目　录

第一部分　计算方法

第一章　误　　差

§1　引　　言

人们在工作或日常生活中，总是要处理数的．这些数可分为两类，一类是精确地反映实际情况的，称为精确数、准确数或真值．如某教室里的学生数为42人，数42是个准确数．另一类则不是这样，称为近似数或称某准确数的近似值．如测量某桌子的长度为110厘米，则110是个近似数．同样计算面积、体积、重量等所得的数都是近似数．一个量的准确数与其近似数之差，称为误差．近似数是有误差的数，在工作中出现误差的大小（或精度）往往是标志着一个工作人员的工作质量．工作中对近似数的问题若处理不当，不是浪费时间，就是给工作带来损失，甚至严重损失．由于近似数是大量存在的，所以在计算方法里，首先讨论误差的概念，就是非常必要的了．误差的内容相当丰富，针对我们需要，在本章里主要讨论误差来源；一个近似数的误差；以及如何表示原始数据的误差对计算结果的影响等．

§2　误差的来源

误差的来源，即产生误差的原因，实际上是各种各样的．

在本节中所要讨论的误差，有下列几种，其中过失误差在此不予讨论。

（一）数学模型误差

在生产斗争和科学实践中，若对客观事物或现象作定量的分析，总要抓住其中的主要矛盾，而忽略其次要因素建立起已知量与未知量之间的数量关系式，即数学模型。这种数学模型与实际问题之间经常要有一定的距离，此即所谓数学模型误差。

例如，质量为 m 的物体，在重力作用下，自由下落，其下落距离 s 与时间 t 满足下列微分方程：

$$m\frac{d^2s}{dt^2}=mg \tag{1.1}$$

其中 g 为重力加速度。

方程（1.1）就是自由落体的数学模型。它忽略了空气阻力这个因素。从而由（1.1）求出的在某一时刻 t 的下落距离 s，也必然是近似的，是有误差的。

（二）观测误差

在数学模型中往往有若干参数或常数，它们多半是观测得来的，因此必然有误差，称之为观测误差。

例如（1.1）中的重力加速度 g，就是观测来的，观测值的精度，依赖于测量仪器的精密程度，还要依赖于人的视力等等。其它还有比重、阻力系数等等，都是观测来的，也都含有误差。在通常情况下，用尺来度量物体得到的数据都具有观测误差。

（三）截断误差

当对数学模型，不能简单地求出其精确解时，就必然采取

某种有效的数值解法。首先要用简单的数学表示式代替数学模型，这样产生的误差，称方法误差或截断误差。

例如，用收敛的无穷级数的前 n 项和作为该级数和的近似值，其余项就是截断误差。如以

$$S_n(x) = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \cdots + \frac{x^n}{n!}$$

代替

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^n}{n!} + \cdots\cdots$$

其截断误差（余项）为

$$R_n(x) = e^{\xi} \cdot \frac{x^{n+1}}{(n+1)!}$$

其中 ξ 在 0 与 x 之间。

（四）舍 入 误 差

在实际计算中，不管用什么样的数字计算工具，只能用有限位数进行。如有的电子计算机或计算器，只能对十进制八位数进行运算，对超过八位的数，它会把它舍入成八位的数，再进行处理。这样由于对数进行舍入产生的误差，称为**舍入误差**，至于舍入的具体办法有大家所熟悉的四舍五入法。不过若被舍去部分的首位数字是5，其余皆为 0 时，还有所谓四舍五入的偶数法则，即当保留部分的末位数字是偶数时，就舍，是奇数时，就入（进 1）

例如，$A = 3.141500$，　　$a = 23.56450$，

取具有三位小数的近似值分别为：

$A \doteq 3.142$，　　$a \doteq 23.564$

实践表明，进行大量运算时，按四舍五入法进行舍入，整个计算过程的误差积累较小。

另外，还有去尾法（只舍不入）及收尾法（只入不舍）。

例如，用去尾法取π到四位小数的近似值：

$$\pi \doteq 3.1415$$

用收尾法取，就是

$$\pi \doteq 3.1416$$

在计算方法中所考虑的误差主要是截断误差和舍入误差。

§3 近似数的误差表示法

近似数的误差表示法，也就是对近似数精确度的表示法，在不同的场合下，其方法各有不同。本节我们将介绍几种常用的方法及其相互间的联系。

（一）绝 对 误 差

定义 1 设x^*是某量的准确值，x是其近似值，我们称差

$$e_x = x^* - x$$

为x对x^*的绝对误差，或x的绝对误差或x的误差。

由定义 1 可知，e_x可正可负，当$e_x > 0$时，称x为x^*的不足近似值；当$e_x < 0$时称x为x^*的过剩近似值。

$|e_x|$的大小，标志着x的精度，一般地，在同一量的不同近似值中，$|e_x|$越小，x的精度越高。

但e_x并不是永远能求出来的。

例如，若用以寸为最小刻度的市尺去量桌子的长，大约为3.45尺，求3.45尺的绝对误差。

此例中，桌子长的准确值x^*是未知的，因此3.45的绝对误差就不知道。在实际中这类问题很多。于是定义 1 就失去了实际意义。为解决这一问题，通常用一个满足$|e_x| \leqslant \Delta x$的较小的数Δx表示近似数x的绝对误差的上限，称数Δx为近似数x的绝对误差界。

由Δx的定义可知

$$|e_x| = |x^* - x| \leqslant \Delta x \tag{3.1}$$

或

$$x - \Delta x \leqslant x^* \leqslant x + \Delta x \tag{3.1$_1$}$$

有时记 x 与Δx为x（$\pm\Delta x$）或$x \pm \Delta x$。

例如，在真空中光速$c = 299796 \pm 4$公里/秒，

即

$$299792\text{公里/秒} \leqslant c \leqslant 299800\text{公里/秒},$$

我们还要指出，取Δx，一般地从 $|e_x|$ 的左侧第一个非零数字起用收尾法取到含有 1 个或 2 个数字为宜.

有了绝对误差界的概念，上述桌子长度的问题，就容易解决了。设桌子长的准确值为x^*，则x^*必定在3.40尺与3.50尺之间。所以$|e_x|$不会超过半寸。即

$$|e_x| = |x^* - 3.45| \leqslant 0.05\ (\text{尺})$$

所以　$\Delta 3.45 = 0.05$。

显然用去尾法或收尾法截取的近似数，其$|e_x|$都不会超过近似数末位的一个单位，所以其绝对误差界可取为该近似数的末位的一个单位。

例如，对圆周率 π，用去尾法和收尾法截取三位数，就得3.14和3.15。它们的绝对误差界都是 0.01，即 $\Delta 3.14 = 0.01$，$\Delta 3.15 = 0.01$。

若用四舍五入法对 π截取五位数字，则得3.1416，其绝对误差界 $\Delta 3.1416 = \frac{1}{2} \times 10^{-4} = 0.00005$。

一般情况下用四舍五入法截取的近似数 x 的$|e_x|$不超过 x 的末位的半个单位，所以 Δx 可取为该近似数 x 的末位的半个单位。设10^s（s 为整数）为x的末位数字所在的位。则

$$\Delta x = \frac{1}{2} \times 10^s \tag{3.2}$$

例如，$a = 3.1416$ 是对 π 用四舍五入法截取的近似值，

6所在的位是10^{-4}（即$s=-4$），故有

$$\Delta 3.1416=\frac{1}{2}\times 10^{-4}$$

特别当$x^*=x$时，$e_x=0$，$\Delta x=0$。

应当指出在通常情况下，我们所说的绝对误差，都是指绝对误差界而言。

绝对误差不能用来比较不同条件下的近似数的精度。

（二）相 对 误 差

先看一个例子，设甲买一吨煤有10斤的误差，乙买100斤煤也有10斤误差，哪一个情况更好些呢？显然甲的情况好一些。而乙的情况是不能允许的，原因是"误差太大"。为什么太大呢？这是人们在头脑里已把10斤的误差与购买量做了比较的结果。即乙买的煤，每10斤就有1斤误差，一斤有0.1斤的误差。而甲买煤每100斤才有半斤误差，一斤有0.005斤误差。可见一个量的近似值的精度，不但与绝对误差有关，而且还与该量本身的大小有关，单位量上具有的误差。为在一般情况下反映这一现象，我们引入表示近似值精度的另一尺度。

定义2 在定义1的假设下，我们称比值

$$\beta_x=\frac{e_x}{x^*}=\frac{x^*-x}{x^*}$$

为x对x^*的相对误差，或近似数x的相对误差。

一般地，在同一量或不同量的几个近似值中，$|\beta_x|$小者，x的精度高。

但在实际计算中由于x^*未知，e_x不能精确地求得，所以β_x也不能精确地算出。从而与处理绝对误差那样，我们引入近似数x的相对误差界δx来表示$|\beta_x|$的较小上限，即

$$|\beta_x|=\frac{|e_x|}{|x^*|}\leqslant\delta x,\quad |x^*|\neq 0 \tag{3.3}$$

$$-\delta x \leqslant \beta_x \leqslant \delta x$$

作为实用公式，我们取

$$\delta x=\frac{\Delta x}{|x|}, \quad 即 \quad \Delta x=|x|\delta x \qquad (3.4)$$

以后简称δx就是x关于x^*的相对误差．有了这个公式，就可以算出上面量桌子长度的相对误差界为

$$\delta 3.45=\frac{0.05}{3.45}\leqslant 0.015=1.5\%$$

甲与乙买煤的相对误差界分别为

$$\delta 2000=\frac{10}{2000}=0.005=0.5\%$$

$$\delta 100=\frac{10}{100}=0.10=10\%$$

后者是前者的20倍，误差太大．工作质量不好．

由δx的定义可知，相对误差表示着在单位近似值中所含有的绝对误差．或者说，绝对误差在整个近似值中占有的比重，所以它是不名数，因而有广泛的适用性，它能更好地反映出误差的特性，或近似数的精度．

由于δx一般比较小，都是以小数形式出现的，故经常把它表示为百分数的形式，从而有百分误差之称．

（三）有 效 数 字

在实际工作中，人们总是愿意把近似数写成十进制的有限形式．因此就总结出不通过计算绝对误差或相对误差，而直接由组成近似数的数字个数来表示近似数精度的方法．

我们熟知，任何十进制数皆可写为10的幂级数的形式．例如，

$$42.67=4\times 10^1+2\times 10^0+6\times 10^{-1}+7\times 10^{-2}$$

$$0.0367=3\times 10^{-2}+6\times 10^{-3}+7\times 10^{-4}$$

一般地，可将准确数x^*（设＞0）的近似值x表示为

$$x = x_1 \times 10^m + x_2 \times 10^{m-1} + \cdots + x_p \times 10^{m-p+1} + \cdots + x_n \times 10^{m-n+1} \quad (3.5)$$

其中$x_1 \neq 0$，x_1，x_2，…，x_n各为0，1、2，…，9中的某个数字。p，n为正整数，m（称为x的阶）为整数。

定义3 对（3.5），如果

$$\Delta x \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{m-p+1} \quad (3.6)$$

则称x准确到10^{m-p+1}位，或者说x是具有p个有效数位的近似数，其中10^m，10^{m-1}，…，10^{m-p+1}都是x的有效数位。

特别当x准确到末位（即$p=n$）时，称x为n位有效数。其中x_1，x_2，…，x_n分别称为x的第1，第2，…，第n位有效数字。

例1 设 $x=3.142$为π的近似值，验证x有几个有效数字。

解 因为

$$|\pi - x| = 0.000407\cdots < 0.0005 = \frac{1}{2} \times 10^{-3}$$

所以 $\Delta 3.142 = \frac{1}{2} \times 10^{-3}$

此处 $m=0$，$m-p+1=-3$，所以$p=4$，即3.142中的3，1，4，2是其4个有效数字。3.142是有效数。

例2 若以22/7的近似值3.142857作为π的近似值，它有几个有效数位?

解 因为

$$|\pi - 3.142857| = 0.00126\cdots < 0.002$$

所以取

$$\Delta 3.142857 < 0.002 < \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$

$m=0$，$m-p+1=-2$，故$p=3$，即3.142857是π的具有3个有效数位的近似值。

读者不难验证，从准确数中用四舍五入法截取的近似值，都是有效数。这就是说它的绝对误差界可取为末位的半个单位。

我们约定：**原始数据都要用有效数字写**。凡是不标明绝对（或相对）误差界的近似数，都被认为是有效数。

这样一来，从一个近似数的表示式就知道了它的绝对误差界（不超过末位的半个单位）或精度。

显然，在（3.6）的条件下，一般地，有效数位多的近似数准确。

于是近似数3.1与近似数3.10就有了不同的含义。前者表示$\Delta 3.1\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-1}$，而后者表示$\Delta 3.10\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-2}$。即3.10比3.1准确度高。所以在近似数的小数部分里，不能随便添加零或抹掉零。

例如，我国1979年的粮食产量为三万二千四百九十万吨，应写为32490×10^4吨。这是近似数，它表明$\Delta 32490\times10^4\leqslant\frac{1}{2}\times10^4$，（5千吨）。即数$32490\times10^4$中有5个有效数字：3，2，4，9，0，如果把它写为

$$3249\times10^5，或324900000$$

就有问题了。前者表示粮食产量的绝对误差界为5万吨，后者表示绝对误差界为半吨。显然这是不符合实际的。

在一些科学计算中，往往把数，例如，31.40590，或0.0003140590分别表示为

$$0.3140590\times10^2，0.3140590\times10^{-3}$$

这叫数的浮点表示，其中0.3140590为有效数，

必须指出，在定义3中的$\Delta x\leqslant\frac{1}{2}\times10^{m-p+1}$，应理解为

$$10^{m-p}<\Delta x\leqslant\frac{1}{2}\times10^{m-p+1} \tag{3.7}$$

否则，与绝对误差界的定义就有矛盾了。

（四）有效数字个数与相对误差界

在定义 3 中表明了近似数的有效数字个数与绝对误差界的关系。下面指出有效数字（位）个数与相对误差界的关系。

定理 1　如果近似数 x 有 p 个有效数字（位）则

$$10^{-(p+1)} < \delta x \leqslant \frac{1}{2x_1} \times 10^{-(p-1)} \qquad (3.8)$$

其中x_1为 x 的第 1 个非零数字。

证明　由（3.5）知

$$x_1 \times 10^m \leqslant x \leqslant (x_1+1) \times 10^m \qquad (3.9)$$

所以由（3.3）及定义 3 得

$$\delta x = \frac{\Delta x}{x} \leqslant \frac{\frac{1}{2} \times 10^{m-p+1}}{x_1 \times 10^m} = \frac{1}{2x_1} \times 10^{-(p-1)}$$

另一方面，由（3.7）及（3.9）得

$$\delta x = \frac{\Delta x}{x} > \frac{10^{m-p}}{(x_1+1) \times 10^m}$$

$$= \frac{1}{x_1+1} \times 10^{-p} \geqslant 10^{-(p+1)}$$ 证完。

例如，取3.14为 π 的近似值，其相对误差界由（3.8）可得

$$\delta 3.14 \leqslant \frac{1}{2 \times 3} \times 10^{-(3-1)} = \frac{1}{6} \times 10^{-2} \doteq 0.17\%$$

若用（3.3）计算，则

$$\delta 3.14 = \frac{\Delta 3.14}{3.14} < \frac{0.16}{314} = 0.051\%$$

可见用（3.8）估计δx，虽然简便，但结果比较粗糙。

推论　如果$\delta x > \frac{1}{2} \times 10^{-p}$，则 x 含有的有效数字（位）个数不超过 p。

证明　用反证法。假设 x 有$p+1$个有效数字（位），则由

定理1得

$$\delta x \leqslant \frac{1}{2x_1} \times 10^{-p} \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-p}$$

这与题设矛盾。证完。

例3　求$\sqrt{6}$的近似值a，使$\delta a \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-3}$。

解　因为$\sqrt{6}=2.4494\cdots\cdots$，$x_1=2$设$a$有$n$个有效数字，由定理1，$\delta a \leqslant \frac{1}{4} \times 10^{-(n-1)}$。令

$$\frac{1}{4} \times 10^{-(n-1)} \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-3}$$

求满足此不等式的最小正整数n，可得$n=4$。故取$a=2.449$，就合乎要求。因为

$$\delta 2.449 \leqslant \frac{1}{4} \times 10^{-3}$$

反之，如果已知近似数x的相对误差界及x_1，则由下述定理可估计出x的有效数字（位）个数。

定理2　如果已知近似数x的相对误差界

$$\delta a \leqslant \frac{1}{2(x_1+1)} \times 10^{-(p-1)} \tag{3.10}$$

则x至少有p个有效数字（位）。

证明　由（3.3）及（3.9），（3.10）知

$$\Delta x = x \times \delta x \leqslant (x_1+1) \times 10^m \times \frac{1}{2(x_1+1)} \times 10^{-(p-1)}$$

$$= \frac{1}{2} \times 10^{m-p+1}$$

由定义3知x至少有p个有效数字（位）。证完。

（五）可 靠 数 字

最后指出，在实际中也往往将x的绝对误差界放宽一些，代替有效数位和有效数字，而引入可靠数位和可靠数字。

定义4 在（3.5）中，如果

$$\Delta x \leqslant 10^{m-p+1}$$

则称 x 为具有 p 个**可靠数位**的近似数。

特别当 $n=p$ 时，就称 x 为具有 n 个**可靠数位**，$x_1, x_2, \cdots, x_n$ 分别称为 x 的第1个，第2个，…，第 n 个可靠数字。

显然有效数一定也是可靠数，反之当然不一定成立。用收尾法或去尾法截取的近似数是可靠的。

如果把定理1．推论及定理2中的有效二字改为可靠，各不等式中的 $\frac{1}{2}$ 换成1，则可得可靠数字（位）个数与相对误差界的诸关系（证明略）。

习　题 1·3

1　比较用 $\frac{22}{7}$ 或3.14代替 π 的精度。

2　$a=225\ (\pm 1)$，$b=2.25\ (\pm 0.01)$，$c=0.00225\ (\pm 0.00001)$，这三个数哪个精度高？由此可得出什么结论？

3　用最小刻度为厘米的米尺量桌子长为1.15米，若用最小刻度为分的市尺量桌子长为3.45尺，哪个准确些，原因是什么？

4　制作一个直径为 $20mm$ 的滚珠，容许直径的绝对误差界为 $0.012mm$，合格品的直径应在哪个范围内？

5　求 $\sqrt{10}$ 的近似值 a，使 $\delta_a \leqslant 0.1\%$。

6　我国古代数学家祖冲之，曾以 $\frac{355}{113}$ 作为 π 的近似值，求此近似值的有效数位个数。

7　如果 x 有 n 个有效数字（位），则

$$\delta x \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-(n-1)}$$

8　如果 $\delta x \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-p}$，求证 x 至少有 p 个有效数字（位）。

9　已知　δa满足下列不等式

$$10^{-(n+2)}<\delta a\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-(n-1)}$$

试估计 a 的有效数位个数。

§4　误差的传播

在近似数的运算过程中，已知数据（初始数据）的误差，对计算结果是有影响的。这就是所谓误差的传播问题。误差的传播是否可控，标志着一个数值方法能否在电子计算机上使用的问题，这个问题很重要，本节我们将给出几个有关的基本概念。

（一）函数值的误差

设 n 元函数$y=f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$在点$X=(x_1,x_2,\cdots,x_n)$附近可微，$A=(a_1,a_2,\cdots,a_n)$ 为 X 附近的点．a_i为x_i的近似值$(i=1,2,\cdots,n)$，e_i为a_i的绝对误差，我们讨论用$f(A)$代替$f(x)$时的误差。

由数学分析知道，函数的改变量，即误差为

$$\Delta f=f(x_1,x_2\cdots,x_n)-f(a_1,a_2,\cdots,a_n)=df+0(\rho)$$

其中　$\rho=(e_1^2+e_2^2+\cdots+e_n^2)^{\frac{1}{2}}$，当 $\rho\to0$ 时，$0(\rho)$ 为比 ρ 高级的无穷小量，

$$df=\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\right)_A e_1+\left(\frac{\partial f}{\partial x_2}\right)_A e_2+\cdots+\left(\frac{\partial f}{\partial x_n}\right)_A e_n \quad (4.1)$$

是 f 在点A处的全微分。我们就取df为 f 在A处的绝对误差，记为$e_f=df$。

显然，$\left|\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)_A\right|$越大，初始数据的误差$e_i$对计算结果——函数值的影响也越大。称$\left|\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)_A\right|$为在绝对误差意义

下，f在点A处的条件数，记为$\text{cond}(f)_e$。当$\left|\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)_A\right|$很大时，称$f$在$A$处是坏条件的。否则，是好条件的。

但对很多问题的计算结果的精度用相对误差来刻画会更好些，于是

设$a_i \neq 0$，a_i的相对误差记为$\varepsilon_{a_i}=\frac{e_i}{a_i}$。设$f(A) \neq 0$，$f$的相对误差记为$\varepsilon_f=e_f/f(A)$。则由（4．1）得

$$\varepsilon_f=\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)_A \frac{a_i}{f(A)} \cdot \varepsilon_{a_i} \tag{4.2}$$

显然，因子$\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)_A \frac{a_i}{f(A)}$反映误差$\varepsilon_{a_i}$对计算结果的影响，其绝对值越大，初始数据的相对误差ε_{a_i}对计算结果的影响也越大。称$\left|\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)_A \frac{a_i}{f(A)}\right|$为在相对误差意义下，$f$在点$A$处的条件数，记为$\text{cond}(f)$。当它很大时，称$f$在$A$处为坏条件的，否则是好条件的。（注意，当不提在什么意义下时，是指在相对误差意义下）在坏条件下，用$f(A)$代替$f(x)$的误差会很大。这时的代替是不适宜的。

例如，设$f(x)=x^2+x-10100$，当$x=100$时，$f(100)=0$。当$x \doteq a=99$时，$f(99)=-200$。则

$$\text{cond}(f)_e=|f'(a)|=199$$

$$\text{cond}(f)=\left|f'(a) \cdot \frac{a}{f(a)}\right|=\left|199 \times \frac{99}{200}\right| \doteq 99$$

可见不论在什么意义下，$f(x)$在a处是坏条件的。用$f(99)$代替$f(100)$，作为其近似值是不适宜的。

（二）代数运算结果的误差

1　和的误差　设

$f(x_1,x_2)=x_1+x_2$，当$x_1 \doteq a_1$，$x_2 \doteq a_2$，$a_1 \times a_2>0$

则由（4.2）得

$$\varepsilon_f = \frac{a_1}{a_1 + a_2}\varepsilon_{a_1} + \frac{a_2}{a_1 + a_2}\varepsilon_{a_2} \tag{4.3}$$

因a_1，a_2同号，所以

$$0 < \frac{a_1}{a_1 + a_2}, \quad \frac{a_2}{a_1 + a_2} < 1$$

故初始数据误差对运算结果——和的影响不大。

2　差的误差，设

$f(x_1, x_2) = x_1 - x_2$，当 $x_1 \doteq a_1$，$x_2 \doteq a_2$，$a_1 \times a_2 > 0$ 时

则由（4.2）得

$$\varepsilon_f = \frac{a_1}{a_1 - a_2}\varepsilon_{a_1} - \frac{a_2}{a_1 - a_2}\varepsilon_{a_2} \tag{4.4}$$

因 a_1，a_2同号，$\left|\frac{a_1}{a_1 - a_2}\right|$，$\left|\frac{a_2}{a_1 - a_2}\right|$中至少有一个大于1，特别当$a_1 \doteq a_2$时，$a_1 - a_2$会很小，$\left|\frac{a_1}{a_1 - a_2}\right|$，$\left|\frac{a_2}{a_1 - a_2}\right|$会很大，故初始数据误差对计算结果会产生很大的影响。所以作减法时，两个几乎相等的近似数相减时，会由于有效数字的减少使差的准确度降低，如

$$73.5842 - 73.5834 = 0.0003$$

原始数据有6个有效数字，而运算结果中只有一个有效数字了。因此在计算中，应尽量设法避免两个非常近似的数相减。如果估计会遇到这种情形，就在取原始数据时多保留几位有效数字，或把算式变形，用等价的算式代替原算式后再计算。

例1　设2.01，2皆为准确数，计算

$$u = \sqrt{2.01} - \sqrt{2}$$

使其具有三个有效数字。

解　因为$\sqrt{2.01} = 1.4177446\cdots\cdots$

$$\sqrt{2} = 1.4142135\cdots\cdots$$

故$\sqrt{2.01}$，$\sqrt{2}$的近似值均应取到 10^{-6} 时才可得到

$$u \doteq 1.417745 - 1.414214 \doteq 3.53 \times 10^{-3}$$

如先将算式变形，则得

$$u = \sqrt{2.01} - \sqrt{2} = \frac{0.01}{\sqrt{2.01} + \sqrt{2}} \doteq \frac{0.01}{1.42 + 1.41}$$

$$= \frac{0.01}{2.83} \doteq 3.53 \times 10^{-3}$$

3　积的误差，设

$f(x_1, x_2) = x_1 x_2$，当$x_1 \doteq a_1$，$x_2 \doteq a_2$时　则由（4．2）得

$$\varepsilon_f = \varepsilon_{a_1} + \varepsilon_{a_2} \qquad (4.5)$$

4　商的误差，设

$f(x_1, x_2) = x_1/x_2, x_2 \neq 0$，当$x_1 \doteq a_1$，$x_2 \doteq a_2$ 时

则由（4．2）得

$$\varepsilon_f = \varepsilon_{a_1} - \varepsilon_{a_2} \qquad (4.6)$$

由（4.5）、（4.6）知积与商的条件数为 1，可见初始数据误差对积与商的影响不大。

5　开平方的误差，设

$f(x_1) = \sqrt{x_1}$，当$x_1 \doteq a_1$时

则由（4．2）得

$$\varepsilon_f = \frac{1}{2}\varepsilon_{a_1} \qquad (4.7)$$

即平方根的条件数为 1/2．平方根的相对误差是被开方数的相对误差的 1/2．即方根的精度比被开方数的精度高．但在实用上，平方根的取数法则是：若 a 有 n 个有效数字，则取$\sqrt{a}$为 n 个有效数字。

例如，$\sqrt{3.8} \doteq 1.949 \doteq 1.9$．

综上所述，可见初始数据误差对计算结果的影响情况，而条件数除能反映出计算结果误差对原始数据误差的增长（或缩减）倍数外还能反映出一个很重要的数学问题，当初始数

据有微小变化（扰动）时，计算结果的敏感程度，当初始数据有微小变化，而计算结果对之不敏感，即变化也很小，就说该数学问题是良态的。若计算结果对之很敏感，即变化很大时，就说这问题是病态的。一个数学问题的敏感程度就是它的性态。

例 2　设$f(x)=x^2+x-10100$，求 $f(99)$ 的相对误差。其中设99的误差为 1 %，再讨论在$x=99$附近，$f(x)$的性态。

解　由（4。2）知

$$\varepsilon_f=f'(99)\times\frac{99}{-200}\times 1\%=199\times\frac{-99}{200}\times 1\%$$

$$\doteq -99\%$$

即函数值的相对误差是初始数据的相对误差的99倍。

其次，由于 $f(99)=-200$，$f(99.9)=-20.09$，所以 $f(99)\doteq 10f(99.9)$，即99与 99.9仅有 1%的差，但其对应的函数值却相差10倍。故$f(x)$在99附近是病态的。

（三）数值稳定性

原始数据是有误差的，在计算过程中，每一步计算还有舍入误差，这些误差必然影响到后继值。如上所述，这就是误差传播的影响。如果对一个数值解法，计算结果受这种传播误差的影响很小。就说此解法是数值稳定的。反之，如果计算结果受这种传播误差的影响很大，就说此解法是数值不稳定的。

特别是用电子计算机解题时，运算次数成千上万，这种传播误差如果累计起来是相当可观的。甚至会使一个问题的解答成为荒谬的。尤其是病态问题，舍入误差对其计算结果往往有非常严重的影响。所以研究病态问题的数值解法，是个重要课题。另外不同的计算方案也可得不同结果。下面看一个例子。

例 3　计算下列积分之值：

$$I_n=e^{-1}\int_0^1 x^n e^x dx\quad n=0,\ 1,\ 2,\ \cdots,\ 13$$

解　用分部积分法可得递推算式

$$I_n = 1 - nI_{n-1} \tag{4.8}$$

特别当　$n=1$时，可算得

$$I_1 = 1 - e^{-1} \doteq 0.6321205 \tag{4.8$_1$}$$

其绝对误差为0.587×10^{-7}。

积分I_n有下列特性：

1°　$I_n > 0$，

2°　$I_n < \frac{1}{n+1} < I_{n-1}$，

3°　当$n\to\infty$时，$I_n\to 0$，

现在用两种方案计算I_n

方案A：用（4.8）（4.8）$_1$算，结果见表中的$I_n(A)$列。

方案B：将（4.8）变形：

$$I_{n-1} = \frac{1}{n}(1 - I_n) \tag{4.9}$$

从后往前计算，为求初值 I_{13}，则由（4.8）

$$nI_{n-1} + I_n = 1$$

而　　$I_n < I_{n-1}$

则有

$$nI_{n-1} < nI_{n-1} + I_n < (n+1)I_{n-1}$$

$$nI_{n-1} < 1 < (n+1)I_{n-1}$$

所以

$$\frac{1}{n+1} < I_{n-1} < \frac{1}{n}$$

于是有

$$I_{n-1} \doteq \left(\frac{1}{n+1} + \frac{1}{n}\right)\Big/ 2 = \frac{2n+1}{2n(n+1)}$$

故当$n=14$时

$$I_{13} \doteq \frac{2\times14+1}{2\times14\times15} = \frac{29}{420} \doteq 0.0690476 \tag{4.9$_1$}$$

其绝对误差为-2.1×10^{-3}，计算结果见表中$I_n(B)$列。

n	$I_n(A)$	$I_n(B)$	n	$I_n(A)$	$I_n(B)$
0	0.6321205	0.6321205	8	0.1009156	0.1009319
1	0.3678794	0.3678794	9	0.0914896	0.0916124
2	0.2642411	0.2642411	10	0.085104	0.0838758
3	0.2072766	0.2072766	11	0.063856	0.0773656
4	0.1708934	0.1708934	12	0.233728	0.0716117
5	0.1455329	0.1455329	13	−2.038464	0.0690476
6	0.1268026	0.1268023	14	29.538496	
7	0.1123818	0.1123835			

从表中可见，不同的方案算得的结果不一样。哪个结果可靠呢？原因在哪里呢？分析如下。

从表中的$I_n(A)$列发现$I_{13}<0$，$I_{14}>0$，跳跃较大。这是不对的，因$I_n>0$。

其次，假定实际运算递推式为

$$\tilde{I}_n=1-n\tilde{I}_{n-1} \tag{4.10}$$

$\tilde{I}_n$为I_n的近似值，那末由（4.8）减（4.10）得

$$\begin{aligned}I_n-\tilde{I}_n&=-n\ (I_{n-1}-\tilde{I}_{n-1})\\&=(-1)^2n(n-1)\ (I_{n-2}-\tilde{I}_{n-2})\ =\cdots=\\&=(-1)^nn!\ (I_0-\tilde{I}_0)\end{aligned} \tag{4.11}$$

由（4.11）可知初始数据的误差0.587×10^{-7}是按$n!$的倍数增长的。

当$n=13$时，$13!\doteq6.277\times10^9$，故由（4.8），知

$$\begin{aligned}I_{13}-\tilde{I}_{13}&\doteq-6.227\times10^9\times0.587\times10^{-7}\\&\doteq-3.655\times10^2\end{aligned}$$

可见$\tilde{I}_{13}$的误差已把I_{13}的真值淹没掉了。

其次看(B)方案的误差传播。设实际运算递推式为

$$\hat{I}_{n-1}=\frac{1}{n}(1-\hat{I}_n)$$

$\hat{I}_n$为I_n的近似值．此式与（4．10）相减：

$$I_{n-1}-\hat{I}_{n-1}=-\frac{1}{n}(I_n-\hat{I}_n)$$

所以

$$I_0-\hat{I}_0=-\frac{1}{1}(I_1-\hat{I}_1)=(-1)^2\frac{1}{1\times 2}(I_2-\hat{I}_2)$$

$$=\cdots=(-1)^n\frac{1}{n!}(I_n-\hat{I}_n)$$

可见初始数据的误差$\hat{I}_n$传播给$\hat{I}_0$，是按$\frac{1}{n!}$的倍数而缩小的。

当 $n=13$时，$\hat{I}_{13}=0.0690476$ 的误差为-2.1×10^{-3} 而 $\frac{1}{13!}\doteq1.6\times10^{-10}$，所以

$$I_0-\hat{I}_0=-16\times10^{-10}\times(-2.1\times10^{-3})=3.36\times10^{-13}$$

即按方案（B）算得的结果是可靠的，方案（B）有较好的数值稳定性。

综上所述，在构造或选择一种计算公式或方案时，必须考虑到它的数值稳定性问题。

习　题 1.4

1　导出二数之和、差、积、商的绝对误差对初始数据误差的依赖关系式。

2　讨论下列函数在指定点附近是好条件还是坏条件的？

（1）$f(x)=\frac{1}{n}\sin(n^2x)$ （$x\doteq0$，$n\to\infty$）

（2）$\mathrm{tg}x$，$x=1$。

3　如何计算下列函数值才比较可靠？

（1）$\mathrm{tg}x_1-\mathrm{tg}x_2$，当 x_1与x_2很接近时；

（2）$\dfrac{1-\cos x}{\sin x}$　当$x=2°$时；

（3）$\mathrm{arctg}(x+1)-\mathrm{arctg}x$，当 x 充分大时；

（4）$10^7(1-\cos x)$，$x=2°$，用四位数学表。

4　建立计算下列积分的递推关系式，并计算其值（以六位小数计算），然后讨论计算结果的可靠性：

（1）$I_n=\int_0^1 x^n e^{x-1}dx$，$n=0$，$1$，…，$9$；

（2）$S_n=\int_0^1 \dfrac{x^n}{x+5}dx$，$n=0$，$1$，…，$20$。

5　当N很大时，怎样计算下面的积分才好？

$$\int_N^{N+1}\frac{dx}{1+x^2}$$

6　讨论二次式$f(x)=x^2+x-1150$　在根附近的性态。

7　设$f(x)=\lg x$，当$x\doteq a$（>0）时，如果已知对数$\lg a$的绝对误差界为$\frac{1}{2}\times10^{-n}$，试估计真数a的相对误差界及有效数字个数。

第二章　代数(或超越)方程的数值解法

§1　引　言

对于低次（一、二次）代数方程和某些特殊的高次代数方程或超越方程已有了一些代数解法，这些方法都是精确解法。但对于生产实际和科学技术中常遇到的较一般的高次代数方程或超越方程，例如：

$$x - tgx = 0$$

$$x^5 - 4x - 2 = 0$$

看来很简单，但用已有的代数方法就难以求出其精确解。这里将要讨论的一般代数或超越方程的数值解法，就是按一定精度去求方程近似根的方法，这些方法都属于近似解法。其基本思想是首先确定所要求的方程的根x^*所在区间，在其内确定初始近似根x_0，然后按某种方法把x_0逐步精确化，直到满足所要求的精度为止。

§2　区间二分法

设实函数$f(x)$在区间$[a, b]$上单调连续。由数学分析大家知道，如果$f(a) \cdot f(b) < 0$，则方程

$$f(x) = 0$$

在区间$[a, b]$内有且只有一个根x^*。

区间二分法的基本思想是：将方程根所在的区间平分为两

个小区间，再判断根属于哪个小区间；把有根的小区间再平分为二，再判断根所在的更小区间，等等；重复这一过程最后求出满足精度要求的近似根，见图2.1.

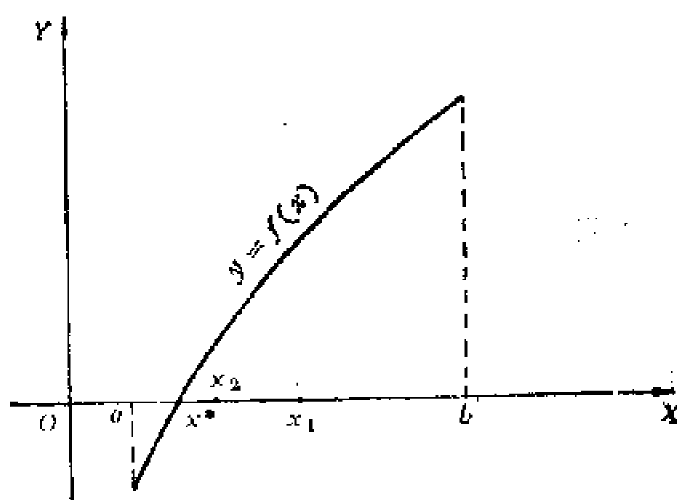


图2.1

不失一般性，假设$f(a)<0$，$f(b)>0$，取

$$x_1=\frac{1}{2}(a+b)$$

则必有下列三种情况之一成立：

（1）若$f(x_1)=0$，则$x_1=x^*\in[a,\ b]$；

（2）若 $f(x_1)>0$，则令$a=a_1$，$x_1=b_1$，

有 $$x^*\in[a_1,b_1]\subset[a,b]，且\ b_1-a_1=\frac{1}{2}(b-a)；$$

（3）若$f(x_1)<0$，则令$x_1=a_1$，$b=b_1$，

有 $$x^*\in[a_1,b_1]\subset[a,b]，且\ b_1-a_1=\frac{1}{2}(a-b).$$

重复这一过程，假定已知 $x^*\in[a_{n-1},\ b_{n-1}]$，$f(a_{n-1})<0, f(b_{n-1})>0$，并取

$$x_n=\frac{1}{2}(a_{n-1}+b_{n-1})$$

则必有下列三种情况之一成立：

（1）若 $f(x_n)=0$，则 $x_n=x^*\in[a_{n-1},\ b_{n-1}]$；

（2）若$f(x_n)>0$，则令$a_{n-1}=a_n$，$x_n=b_n$，

有 $$x^*\in[a_n,\ b_n]\subset[a_{n-1},\ b_{n-1}]，且$$

$$b_n-a_n=\frac{1}{2}(b_{n-1}-a_{n-1})；$$

（3）若$f(x_n)<0$，则令$x_n=a_n$，$b_{n-1}=b_n$，

有 $x^*\in[a_n, b_n]\subset[a_{n-1}b_{n-1}]$，且

$$b_n-a_n=\frac{1}{2}(b_{n-1}-a_{n-1})。$$

若再取

$$x_{n+1}=\frac{1}{2}(a_n+b_n) \qquad (2.1)$$

作为所求根 x^* 的近似值，其误差估计式为

$$|x^*-x_{n+1}|\leqslant\frac{1}{2}(b_n-a_n)=\frac{1}{2^{n+1}}(b-a) \qquad (2.2)$$

综上所述，设$f(x)$在区间$[a, b]$上有一阶导数存在且不变号，如果$f(a)f(b)<0$，则由（2.2）知，

$$x_n\to x^* \quad (n\to\infty)$$

且$|x^*-x_n|$收敛于零的速度，相当于以$\frac{1}{2}$为公比的等比级数收敛于零的速度。

例 用区间二分法求方程

$$x^3-2x^2-4x-7=0$$

在$[3, 4]$内的根，精确到10^{-3}。

解 为使x_n精确到10^{-3}，用（2.2）式估计出 n 的最小值。令

$$\frac{1}{2^n}(b-a)\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-3}$$

由$b-a=4-3=1$解得$n\geqslant11$，即求出 x_{11} 可达到精度要求。具体计算如下：

因为 $f(3)<0$，$f(4)>0$，所以$x^*\in[3, 4]$，

$$x_1=\frac{1}{2}(3+4)=3.5, \quad f(x_1)<0$$

所以有 $x^*\in[3.5, 4]$；

$$x_2=\frac{1}{2}(3.5+4)=3.75, \quad f(x_2)>0$$

所以有　$x^*\in[3.5,\ 3.75]$；

$$x_3=\frac{1}{2}(3.5+3.75)=3.625,\quad f(x_3)<0$$

所以有　$x^*\in[3.625,\ 3.75]$；

$$x_4=\frac{1}{2}(3.625+3.75)\doteq 3.688$$

$f(x_4)>0$，所以有　$x^*\in[3.625,\ 3.688]$；

$$x_5=\frac{1}{2}(3.625+3.688)\doteq 3.657,\quad f(x_5)>0$$

所以有　$x^*\in[3.625,\ 3.657]$；

$$x_6=\frac{1}{2}(3.625+3.657)=3.641,\quad f(x_6)>0$$

所以有　$x^*\in[3.625,\ 3.641]$；

$$x_T=\frac{1}{2}(3.625+3.641)=3.633,\quad f(x_7)>0$$

所以有　$x^*\in[3.625,\ 3.633]$；

$$x_8=\frac{1}{2}(3.625+3.633)=3.629,\quad f(x_8)<0$$

所以有　$x^*\in[3.629,\ 3.633]$；

$$x_9=\frac{1}{2}(3.629+3.633)=3.631, f(x_9)<0$$

所以有　$x^*\in[3.631,\ 3.633]$；

$$x_{10}=\frac{1}{2}(3.631+3.633)=3.632,\quad f(x_{10})>0$$

所以有　$x^*\in[3.631,\ 3.632]$；

$$x_{11}=\frac{1}{2}(3.631+3.632)\doteq 3.632$$

$$x^*\doteq 3.632=x_{11}$$

且有　$|x^*-x_{11}|\leqslant\frac{1}{2^{11}}(4-3)\doteq 4.9\times 10^{-4}\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{-3}$.

区间二分法的优点是程序简单，对函数$f(x)$性质要求低。但它不能用来求重根，复根。在实际计算中区间二分法常用来

求较好的含根区间和初始近似值。

习　　题 2.2

1　用区间二分法求下列方程的最小正根，精确到10^{-3}

（1）　$x^3-412=0$,

（2）　$x^3-2x-5=0$

2　用区间二分法确定方程

$$x^3-3x+1=0$$

最小正根所在区间$[a, b]$，使之满足：

$$K=\frac{M_2}{2m_1}<1,\quad (\text{其中 } M_2=\max_{a\leq x\leq b}|f''(x)|,$$

$$m_1=\min_{a\leq x\leq b}|f'(x)|)\ .$$

3　设连续函数$f(x)$在$[a, b]$内只有一个根，如果把区间逐次三等分，能得出什么样结论？与区间二分法比较其优劣。

§3 弦　截　法

设方程$f(x)=0$在区间$[a, b]$内有唯一根x^*，在$[a, b]$内曲线$y=f(x)$上任取两点$A(a, f(a))$，$B(b, f(b))$作弦，用此弦与x轴的交点的横坐标x_1作为x^*的近似值（见图2.2），这种求方程近似根的方法称为弦截法（亦称弦法）。

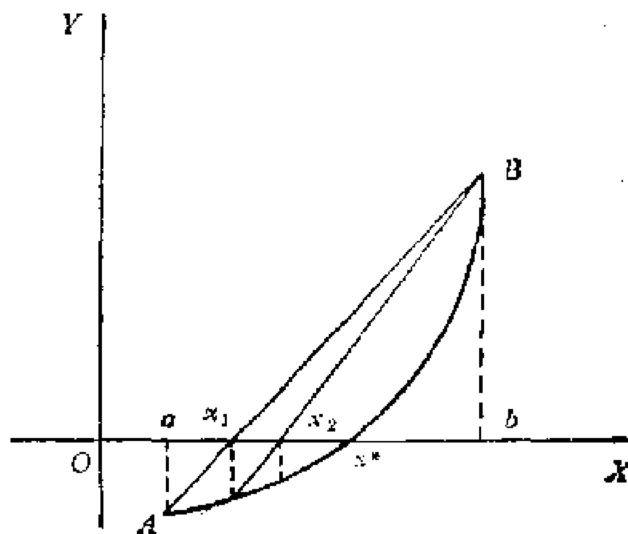


图　2.2

下面分别来讨论

单点弦法和双点弦法。

（一）单点弦法

设方程

$$f(x)=0 \tag{3.1}$$

在区间$[a, b]$内只有一个根x^*。

我们固定点$(b, f(b))$，取$x_0=a$作为x^*的初始近似值。通过两点$(b, f(b))$，$(a, f(a))$作弦（见图2.3），其方程为

$$y=f(a)+\frac{f(b)-f(a)}{b-a}(x-a)$$

此弦与x轴的交点横坐标为

$$x_1=a-\frac{b-a}{f(b)-f(a)}f(a)$$

将x_1作为曲线与x轴交点x^*的第一近似值。

若$f(x_1)=0$，则$x_1=x^*$。否则，再过两点$(b, f(b))$，$(x_1, f(x_1))$作弦，这个弦与x轴的交点横坐标为

$$x_2=x_1-\frac{b-x_1}{f(b)-f(x_1)}f(x_1)$$

将x_2作为x^*的第二近似值。

继续做下去，可得一序列$\{x_n\}$，如果此序列收敛，则极限为所求方程$f(x)=0$的根x^*。那么，在什么条件下，由单点弦法得到的序列$\{x_n\}$收敛到x^*？

下述定理回答了这一问题。

定理1 设$f(x)$满足条件：

（1）$f(a)\cdot f(b)<0$

（2）$f'(x), f''(x)$在$[a,b]$上连续且不变号，

（3）$f'(x)\cdot f''(x)>0$，取$x_0=a$，

则由程序

$$x_{n+1}=x_n-\frac{b-x_n}{f(b)-f(x_n)}f(x_n) \quad n=0,1,\cdots \tag{3.2}$$

得到的序列$\{x_n\}$单调收敛于x^*，且有线性收敛速度。

证明 由条件(1)，(2)知$f(x)$在$[a, b]$内有唯一根x^*。以下证明$\{x_n\}$单调收敛于x^*，为此首先证明$\{x_n\}$单调有界。

不失一般性，不妨设$f(a)=f(x_0)<0, f(b)>0, f'(x)>0$，$f''(x)>0$，如图2.3所示。

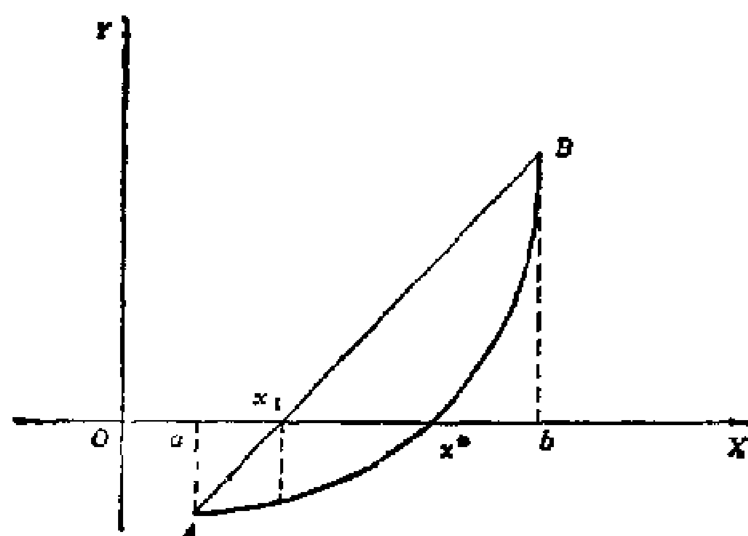


图 2.3

由于 $x_0=a$，$b-x_0>0$，$f'(x)>0$，可得

$$f(b)-f(x_0)>0$$

$$x_1=x_0-\frac{b-x_0}{f(b)-f(x_0)}f(x_0)>x_0$$

再证明$x_1<x^*$。因为$f'(x)>0$，$f(x)$单调上升，所以只须证明$f(x_1)<0$即可。为此构造函数

$$g(x)=\frac{f(b)-f(x)}{b-x}$$

则有

$$g'(x)=\frac{-f'(x)(b-x)+[f(b)-f(x)]}{(b-x)^2}$$

$$=\frac{\frac{f''(\xi)}{2}(b-x)^2}{(b-x)^2}=\frac{f''(\xi)}{2}>0$$

其中$\xi\in[a, b]$，由此得$g(x)$为单调上升函数。

由已证 $x_0<x_1$知

$$\frac{f(b)-f(x_1)}{b-x_1}>\frac{f(b)-f(x_0)}{b-x_0}$$

即

$$f(x_1)<f(b)-\frac{f(b)-f(x_0)}{b-x_0}(b-x_1)=0$$

由此证明了

$$x_0<x_1<x^*<b$$

一般地，由$x_0<x_i<x^*$可同样证明

$$x_0<x_i<x_{i+1}<x^*<b$$

由此得由（3．2）产生的序列$\{x_n\}$单调上升，且有上界x^*，故必有极限，设为$\bar{x}$。

对（3．2）两边取极限得

$$\bar{x}=\bar{x}-\frac{b-\bar{x}}{f(b)-f(\bar{x})}f(\bar{x})$$

由$b>\bar{x}$得

$$f(\bar{x})=0$$

又由于$f(x)=0$在$[a, b]$内有唯一根，因此

$$\bar{x}=x^*$$

即 $x_n\to x^*\quad(n\to\infty)$ 证完。

为了讨论$\{x_n\}$收敛x^*的速度，我们引入敛速这一概念。

定义 设某方法确定的序列$\{x_n\}$收敛于方程的根x^*，如果存在正实数P，使得

$$\frac{|x^*-x_{n+1}|}{|x^*-x_n|^P}\to C\quad(\neq 0)\quad(n\to\infty)$$

则称序列$\{x_n\}$收敛于x^*的敛速为P阶，或称该方法具有P阶敛速。

特别地，当$P=1$时，称方法为线性（一次）收敛，当$P=2$

时，称方法为平方（二次）收敛，当$1<P<2$时，称方法为超线性收敛。

由此定义可见，一个方法的敛速实际就是误差的收缩率，敛速的阶越高，则误差缩减的越快，也就是方法收敛的越快。

下面我们来证明单点弦法具有线性敛速。由敛速定义只需证明：

$$\frac{|x^*-x_{n+1}|}{|x^*-x^n|}\to C \quad (\neq 0) \quad (n\to\infty)$$

为此令

$$\varphi(x)=x-\frac{b-x}{f(b)-f(x)}f(x) \tag{3.3}$$

则由（3.2）得

$$x_{n+1}=\varphi(x_n)$$

而且　$x^*=\varphi(x^*)$

故有

$$x_{n+1}-x^*=\varphi(x_n)-\varphi(x^*)=\varphi'(\xi_n)(x_n-x^*)$$

其中$\xi_n\in(x_n,x^*)$，

$$|x_{n+1}-x^*|=|\varphi'(\xi_n)|\cdot|x_n-x^*|$$

$$\frac{|x_{n+1}-x^*|}{|x_n-x^*|}=|\varphi'(\xi_n)|$$

取极限得

$$\frac{|x_{n+1}-x^*|}{|x_n-x^*|}\to|\varphi'(x^*)| \quad (n\to\infty)$$

当$\varphi'(x^*)\neq 0$时，由定义得方法具有线性（一次）敛速。证完。

定理2　设$f(x)$在$[a,b]$上满足条件：

（1）$f(a)\cdot f(b)<0$，

（2）$f'(x)$，$f''(x)$连续，不变号，

（3）$f'(x)\cdot f''(x)<0$，取$x_0=b$，

则由程序

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n - a}{f(x_n) - f(a)} f(x_n),$$

$$n = 0, 1, \cdots \qquad (3.4)$$

得到的序列$\{x_n\}$单调收敛于x^*，且有线性敛速。

此定理证明与定理1类似(略)。其几何解释见图2．4。

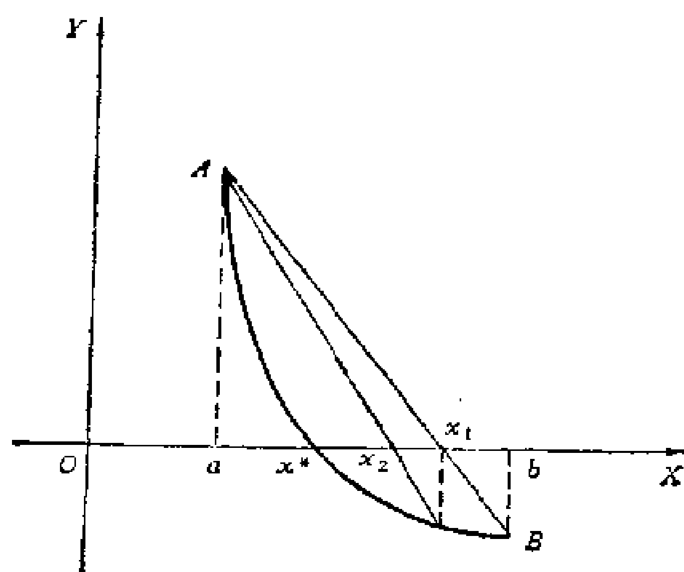


图 2.4

例1　求 $x^3 - 0.2x^2 - 0.2x - 1.2 = 0$ 在区间[1, 1.5]内的实根（精确到10^{-3}）．

解（1）确定有根区间：

因为 $f(1) = -0.6 < 0$，$f(1.5) = 1.425 > 0$，所以$x^* \in [1, 1.5]$。

（2）检验 $f'(x) = 3x^2 - 0.4x - 0.2 > 0$

$f''(x) = 6x - 0.4 > 0$

取$x_0 = a = 1$，使用公式：

$$x_{n+1} = x_n - \frac{1.5 - x_n}{f(1.5) - f(x_n)} f(x_n)$$

$$n = 0, 1, \cdots$$

（3）具体计算如下：

n	x_n	$f(x_n)$
0	1	—0.6
1	1.15	—0.173
2	1.190	—0.036
3	1.193	—0.025
4	1.198	—0.007
5	1.199	—0.004
6	1.200	0.000

所以 $x^* \doteq 1.200$。

(二) 双 点 弦 法

单点弦法在计算过程中只一个点变动，而另一个点固定不动。下面我们讨论两个点都变动的更一般情况，见图2. 5。

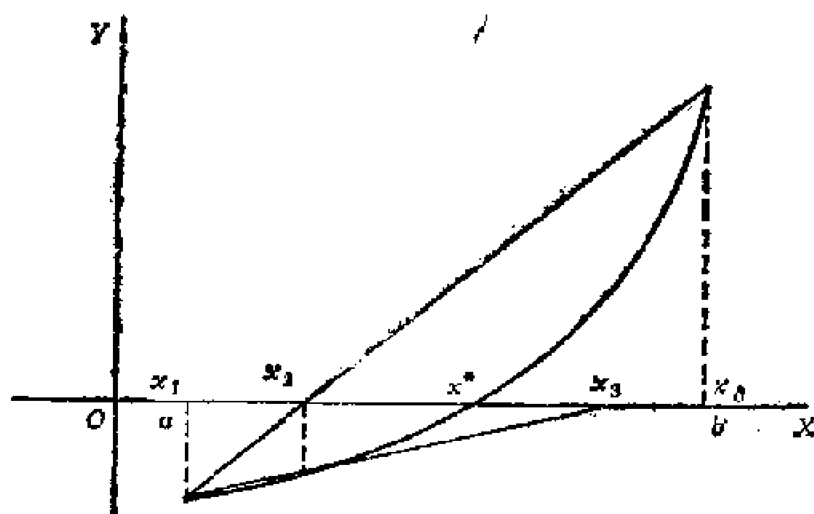


图 2.5

设$f(a)\cdot f(b)<0, f'(x)$，$f''(x)$在$[a, b]$上连续且不变号。过点$(x_0, f(x_0))$，$(x_1\ f(x_1))$作弦，其方程为

$$y=\frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}(x-x_1)+f(x_1) \qquad (3.5)$$

令　$y=0$，解出x即为此弦与x轴的交点

$$x_2=x_1-\frac{x_1-x_0}{f(x_1)-f(x_0)}f(x_1)$$

取x_2作为x^*的第二近似值。

同理，再过点$(x_1, f(x_1))$，$(x_2, f(x_2))$作弦，求得其与x轴交点为

$$x_3=x_2-\frac{x_2-x_1}{f(x_2)-f(x_1)}f(x_2)$$

取x_3作为x^*的第三近似值。

一般地，假如已求得x_{n-1}，x_n，则过点$(x_{n-1}, f(x_{n-1}))$，$(x_n, f(x_n))$作弦，求得其与x轴的交点为

$$x_{n+1}=x_n-\frac{x_n-x_{n-1}}{f(x_n)-f(x_{n-1})}f(x_n)$$

$$n=0,\ 1,\ \cdots \qquad (3.6)$$

取x_{n+1}作为x^*的第$n+1$个近似值。

递推公式（3.6）就是双点弦法的迭代公式，其中x_0，x_1为初始近似，可在$[a, b]$内任意选取。

下面讨论双点弦法的收敛条件和收敛速度问题。

定理 3　若$f(x)$在$[a, b]$上满足条件：

（1）$f(a)\cdot f(b)<0$，

（2）$f'(x)$，$f''(x)$连续，且$f'(x)\neq 0$，

（3）$K\cdot R\leqslant\rho<1$，　$R=\max\{|x_1-x^*|,\ |x_0-x^*|\}$，$K=M_2/2m_1$，$M_2=\max|f''(x)|$，$m_1=\min|f'(x)|$，

则由双点弦法程序（3.6）得到的序列$\{x_n\}$超线性收敛于$f(x)=0$的唯一根x^*。

证明　由条件（1）、（2），$f(x)=0$在$[a, b]$内有唯一根x^*这是显然的。

为证明$\{x_n\}$收敛于x^*，先考察用弦代替曲线产生的误差。我们令

$$L_1(x)=f(x_1)+\frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}(x-x_1)$$

$$R_1(x)=f(x)-L_1(x)$$

因为点$(x_0, f(x_0))$，$(x_1, f(x_1))$是弦和曲线的两个交点，所以有

$$R_1(x_0)=R_1(x_1)=0$$

从而可设

$$f(x)-L_1(x)=K(x)(x-x_0)(x-x_1) \qquad (3.7)$$

其中$K(x)$为待定函数。

为了确定$K(x)$，构造函数

$$\Phi(t)=f(t)-L_1(t)-K(x)(t-x_0)(t-x_1)$$

$\Phi(t)$至少有三个零点x_0，x_1，x，由洛尔定理得 $\Phi''(t)$ 至少有一个零点，设为ξ_1，则

$$\Phi''(\xi_1)=f''(\xi_1)-K(x)\cdot 2=0$$

所以 $$K(x)=\frac{1}{2}f''(\xi_1)$$

其中ξ_1在x_0，x_1，x中的最小值与最大值之间。将$K(x)$代入(3.7)得误差函数

$$f(x)-L_1(x)=\frac{1}{2}f''(\xi_1)(x-x_0)(x-x_1)$$

为导出x_0，x_1，x_2的误差之间关系，我们用 $x=x^*$ 代入上式，由于$f(x^*)=0$得

$$-L_1(x^*)=\frac{1}{2}f''(\xi_1)(x^*-x_0)(x^*-x_1)$$

又因为 $L_1(x_2)=0$，故上式可写为

$$L_1(x_2)-L_1(x^*)=\frac{1}{2}f''(\xi_1)(x^*-x_0)(x^*-x_1)$$

由中值定理知

$$x_2-x^*=\frac{L_1(x_2)-L_1(x^*)}{L'_1(\xi_2)}$$

$$L'_1(x)=\frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}=f'(\eta_1)$$

其中ξ_2在x_2与x^*之间，η_1在x_0与x_1之间。于是有

$$x^*-x_2=-\frac{f''(\xi_1)}{2f'(\eta_1)}(x^*-x_0)(x^*-x_1) \tag{3.8}$$

同理可得x_{n-1}，x_n，x_{n+1}的误差之间的关系式

$$x^*-x_{n+1}=-\frac{f''(\xi_n)}{2f'(\eta_n)}(x^*-x_{n-1})(x^*-x_n)$$

$$n=1,\ 2,\ \cdots \tag{3.9}$$

其中ξ_n在x_{n-1}，x_n，x^*的最小值和最大值之间，η_n在x_{n-1}和x_n之间。

（3.9）表明x_{n+1}的误差与x_n和x_{n-1}的误差之积成正比。

如果令$e_n=|x^*-x_n|,n=0,1,\cdots$，由已知条件：$Ke_0\leqslant\rho<1$，$Ke_1\leqslant\rho<1$和（3.9）得：

$$e_2\leqslant Ke_1e_0\leqslant\rho e_0$$

$$e_3\leqslant Ke_2e_1\leqslant\rho^2 e_0$$

$$e_4\leqslant Ke_3e_2\leqslant\rho^4 e_0$$

$$\cdots\quad\cdots\quad\cdots$$

$$e_{n+1}\leqslant Ke_ne_{n-1}\leqslant\rho^{2(n-1)}e_0$$

当$n\to\infty$时，有$\rho^{2(n-1)}e_0\to 0$，即

$$x_n\to x^*\quad(n\to\infty)$$

下面我们讨论$\{x_n\}$收敛于x^*的速度问题。由（3.9）得

$$e_{n+1}=K_ne_ne_{n-1}$$

$$\frac{e_{n+1}}{e_ne_{n-1}}=K_n\to K^*\quad(n\to\infty) \tag{3.10}$$

其中 $K_n=\left|\frac{f''(\xi_n)}{2f'(\eta_n)}\right|$，$K^*=\left|\frac{f''(x^*)}{2f'(x^*)}\right|$

假设此法具有P阶敛速，则由敛速定义得

$$\frac{e_{n+1}}{e_n^P}\to C,\quad\frac{e_n}{e_{n-1}^P}\to C\quad(n\to\infty)$$

于是有

$$e_{n+1}\sim Ce_n^P,\quad e_{n-1}\sim C^{-\frac{1}{P}}e_n^{\frac{1}{P}}$$

再由（3.10）得

$$e_{n+1}\sim Ce_n^P\sim K^*e_ne_{n-1}$$

$$\sim K^*C^{-\frac{1}{P}}e_n^{1+\frac{1}{P}} \qquad (3.11)$$

（3.11）说明 $P=1+\frac{1}{P}$

$$C=C^{-\frac{1}{P}}K^*$$

从而解得：$P=\frac{1+\sqrt{5}}{2}\doteq 1.618$

$$C=(K^*)^{\frac{P}{1+P}}$$

即双点弦法敛速为1.618阶，超线性收敛。

由于定理3是局部收敛定理（即在含有 x^* 的充分小邻域内满足条件），所以若区间$[a, b]$取得较大，定理条件往往不能满足。为了使用方便，我们给出：

定理4 设$f(x)$在$[a, b]$上满足条件：

（1） $f(a)f(b)<0$

（2） $f'(x)$，$f''(x)$ 连续，不变号，

（3） 取x_0，x_1，使得

$$f(x_0)f''(x)>0,\ f(x_1)f''(x)>0$$

则双点弦法程序（3.6）得到的序列$\{x_n\}$超线性单调收敛于x^*。

例1 用双点弦法计算$\sqrt{2}$（精确到10^{-4}）。

解 计算$\sqrt{2}$相当于求方程

$$x^2-2=0$$

的正根。

易知 $x^*\in[1, 2]$，由于

$$f'(x)=2x,\ f''(x)=2$$

得到在区间[1，2]上：$m_1=2$，$M_2=2$，$K=\frac{M_2}{2m_1}=\frac{1}{2}<1$，

$K\cdot R\leqslant\frac{1}{2}<1$，满足定理3条件。

用公式（3.6）计算如下：

$$x_0=1,\qquad x_1=2$$

$$x_2=1.3333,\ x_3=1.4000$$

$$x_4=1.3320,\ x_5=1.4146$$

$$x_6=1.4142,\ x_7=1.4142$$

所以 $\sqrt{2}\doteq1.4142$

例2 用双点弦法求下列方程的最小正根

$$x^3+1.1x^2+0.9x-1.4=0\ （精确到10^{-4}）$$

解（1）确定含最小正根区间：

因为 $f(0)=-1.4<0$，$f(1)=1.6>0$，所以

$$x^*\in[0,\ 1]$$

（2）检验收敛条件确定初值：

$$f'(x)=3x^2+2.2x+0.9>0$$

$$f''(x)=6x+2.2>0$$

由$f(x_0)f''(x)>0$，$f(x_1)f''(x)>0$选取

$$x_0=1,\ x_1=0.8$$

（3）用公式（3.6）计算如下：

$$x_0=1,\qquad x_1=0.8$$

$$x_2=0.6992,\ x_3=0.6735$$

$$x_4=0.6707,\ x_5=0.6707$$

所以 $x^*\doteq0.6707$

习 题 2.3

1 用单点，双点弦法求下列方程的最小正根（精确到

10^{-3}）.

（1）$x^3-2x-5=0$,

（2）$3x-\cos x-1=0$,

（3）$x-\operatorname{tg}x=0$,

（4）$2^x-4x=0$,

（5）$x^4-x^3-3x^2+12x-12=0$.

2　试证用双点弦法计算$\sqrt{a}\,(a>0)$的迭代公式为：

$$x_{n+1}=\frac{x_n x_{n-1}+a}{x_n+x_{n-1}},\quad n=1,\ 2,\ \cdots$$

3　设x^*为$f(x)=0$在$[a,\ b]$内的根，x_n为x^*的近似值，且　$m=\min\limits_{a\leqslant x\leqslant b}|f'(x)|\neq 0$，求证：

$$|x_n-x^*|\leqslant\frac{|f(x_n)|}{m}$$

4　当$f'(x)>0, f''(x)<0$时，论证双点弦法收敛定理4.

5　试证双点弦法有后天误差估计式：

$$|x_{n+1}-x^*|\leqslant\frac{M_2}{2m_1}|x_{n+1}-x_n|\cdot|x_{n+1}-x_{n-1}|$$

其中$M_2=\max\limits_{a\leqslant x\leqslant b}|f''(x)|$，$m_1=\min\limits_{a\leqslant x\leqslant b}|f'(x)|$.

6　试证$f(x)$在$[a,\ b]$上满足条件：

（1）$f(a)f(b)<0$,

（2）$f'(x)$，$f''(x)$ 连续，不变号，

（3）$|1-f^{-1}(a,\ b)f'(x)|\leqslant\rho<1$,

则平行弦法程序：

$$x_{n+1}=x_n-f^{-1}(a,\ b)f(x_n),\quad n=0,\ 1,\ \cdots$$

产生的序列$\{x_n\}$收敛于x^*. 其中$f^{-1}(a,b)=(b-a)/[f(b)-f(a)]$.

§4　切　线　法

在上节我们讨论了在区间$[a,\ b]$上用弦代替曲线求方程

$$f(x)=0 \tag{4.1}$$

的近似根的方法。本节将讨论用切线来代替曲线求方程近似根的方法，此方法称为切线法（或牛顿(New ton）法）．它是求方程根比较有效的方法之一。

切线法的基本思想是：设x_0为方程（4.1）的一个近似根，过曲线$y=f(x)$上的点$(x_0, f(x_0))$作曲线的切线，取此切线与x轴的交点横坐标x_1作为x^*的一个新的近似值，……见图2.6。

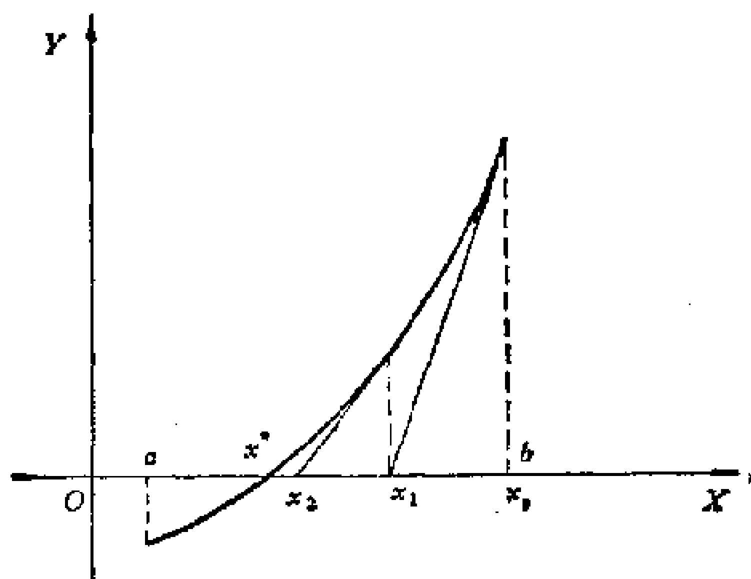


图 2.6

为导出切线法的计算公式，设$f(x)$在$[a, b]$上满足条件：

$f(a)<0$，$f(b)>0$，$f'(x)>0$，$f''(x)>0$，且连续。

取初始近似$x_0=b$，过点$(x_0, f(x_0))$作切线，其方程为

$$y=f'(x_0)(x-x_0)+f(x_0)$$

它与x轴的交点横坐标为

$$x_1=x_0-\frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

取x_1作为x^*的第一近似值。

同理过点$(x_1, f(x_1))$作切线，其方程为

$$y=f'(x_1)(x-x_1)+f(x_1)$$

令$y=0$，求得此切线与x轴交点的横坐标为

$$x_2=x_1-\frac{f(x_1)}{f'(x_1)}$$

取x_2作为x^*的第二近似值。

一般地，如果已求得x^*的第n个近似值x_n，则过点$(x_n, f(x_n))$作切线，其方程为

$$y=f'(x_n)(x-x_n)+f(x_n)$$

令$y=0$，求得它与x轴交点的横坐标为

$$x_{n+1}=x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad n=0, 1, \cdots \tag{4.2}$$

取x_{n+1}作为x^*的第$n+1$个近似值。

递推公式（4.2）就是切线法（牛顿法）的迭代公式

下面讨论切线法的收敛条件。

定理 设$f(x)$在$[a, b]$上满足条件：

（1）$f(a)f(b)<0$

（2）$f'(x)$，$f''(x)$连续，不变号，

（3）取x_0，使得$f(x_0)f''(x)>0$，

则方程$f(x)=0$在$[a, b]$内有唯一根x^*，且由切线法迭代程序（4.2）确定的序列$\{x_n\}$收敛于x^*，具有二阶敛速。

证明 由条件（1），（2）知方程$f(x)=0$在区间$[a, b]$内有唯一根x^*。

以下证明当$n\to\infty$时，$x_n\to x^*$。为此证明$\{x_n\}$为单调有界序列。

不失一般性，由定理条件不妨假设：$f(a)<0$，$f(b)>0$，$f'(x)>0$，$f''(x)>0$，$f(x_0)>0$。

由$f'(x)>0$知$f(x)$为单调上升，

又由于$f(x_0)>0$知$x^*<x_0$。而

$$x_1=x_0-\frac{f(x_0)}{f'(x_0)}<x_0$$

另一方面，将$f(x)$在x_0处作泰劳展开：

$$f(x)=f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)+\frac{1}{2}f''(\xi_0)(x-x_0)^2$$

其中ξ_0在x_0和x之间。

将$x=x^*$代入上式得

$$f(x^*)=f(x_0)+f'(x_0)(x^*-x_0)+\frac{1}{2}f''(\xi_0)(x^*-x_0)^2$$

$$=0$$

所以有 $f(x_0)+f'(x_0)(x^*-x_0)=-\frac{1}{2}f''(\xi_0)(x^*-x_0)^2$

用$f'(x_0)$除等式两边得

$$x^*-\left[x_0-\frac{f(x_0)}{f'(x_0)}\right]=-\frac{1}{2}\ \frac{f''(\xi_0)}{f'(x_0)}(x-x_0)^2$$

即 $$x^*-x_1=-\frac{1}{2}\ \frac{f''(\xi_0)}{f'(x_0)}(x^*-x_0)^2<0 \qquad (4.3)$$

所以 $x^*<x_1<x_0$

一般地，由$x^*<x_n$同样可证得：

$$x_1^*-x_{n+1}=-\frac{1}{2}\ \frac{f''(\xi_n)}{f'(x_n)}(x^*-x_n)^2<0 \qquad (4.4)$$

$$x^*<x_{n+1}<x_n,\quad n=0,\ 1,\ \cdots \qquad (4.5)$$

由此得序列$\{x_n\}$为单调下降序列，且有下界为x^*，所以必有极限，设为$\bar{x}$。

对（4．2）两边取极限得

$$\bar{x}=\bar{x}-\frac{f(\bar{x})}{f'(\bar{x})}$$

故得

$$f(\bar{x})=0$$

再由方程 $f(x)=0$在$[a,\ b]$内有唯一根，得

$$\bar{x}=x^*$$

即

$$x_n\to x^*\ (n\to\infty)$$

再由（4.4）得：

$$\frac{|x^*-x_{n+1}|}{|x^*-x_n|^2}=\left|\frac{f''(\xi_n)}{2f'(x_n)}\right|\to\left|\frac{f''(x^*)}{2f'(x^*)}\right| \qquad (n\to\infty)$$

当$f'(x^*)\neq 0$时，切线法具有二阶敛速。证完。

由于切线法收敛速度快，不仅在求解单个方程，而且在求解非线性方程组上有着广泛的应用。但切线法需要计算导数值，为了避免计算导数值，产生了简化牛顿法，拟牛顿法等种种改进。

例 1　证明计算$\sqrt[3]{a}$的牛顿程序为

$$x_{n+1}=\frac{1}{3}\left(2x_n+\frac{a}{x_n^2}\right) \tag{4.6}$$

并用此公式计算$\sqrt[3]{411.7910}$（精确到10^{-6}）。

解　因计算$\sqrt[3]{a}$相当于求方程

$$x^3-a=0$$

的根。将$f(x)=x^3-a$，$f'(x)=3x^2$ 代入（4.2）得

$$x_{n+1}=x_n-\frac{x_n^3-a}{3x_n^2}$$

$$=\frac{1}{3}\left(2x_n+\frac{a}{x_n^2}\right)$$

下面计算$\sqrt[3]{411.7910}$。因为 $f(7)<0$，$f(8)>0$，所以$x^*\in[7,8]$。而且，

$$f'(x)=3x^2>0,\ f''(x)=6x>0$$

所以取 $x_0=8$，有$f(x_0)f''(x)>0$。

应用公式（4.6）计算结果如下：

$x_1=7.48$，　　$x_2=7.439977$

$x_3=7.439760$，$x_4=7.439760$

所以有

$$\sqrt[3]{411.7910}\doteq 7.439760$$

例 2　用切线法求下列方程在［0，0.1］内的根（精确到10^{-7}）。

$$\text{tg}x-4.88889\sin x+0.25=0$$

解 因$f(0)=2.25>0$，$f(0.1)=-0.138<0$，

所以 $x^*\in[0,\ 0.1]$。而在区间$[0,\ 0.1]$上，

$$f'(x)=\frac{1}{\cos^2x}-4.88889\cos x<0$$

$$f''(x)=\frac{2\sin x}{\cos^2x}+4.88889\sin x>0$$

所以取$x_0=0$，则有$f(x_0)f''(x)>0$。

应用切线法公式（4.2）计算结果如下：

$$x_1=0.0642856,\quad x_2=0.0643644$$

$$x_3=0.0643648,\quad x_4=0.0643648$$

所以有

$$x^*\doteq0.0643648$$

习　　题 2.4

1　用切线法求下列方程的最小正根（精确到10^{-4}）。

（1）$x^3-2x-5=0$，

（2）$x^3-3x+1=0$，

（3）$x-\text{tg}x=0$，

（4）$2^x-4x=0$，

（5）$x^4-40x^3+70x^2-15=0$。

2　设 $N>0$，试导出计算$\frac{1}{N}$，$\sqrt{N}$的牛顿程序，并证明：

$$\sqrt{N}\doteq\frac{A+B}{4}+\frac{N}{A+B}\qquad(N=A\cdot B)$$

3　试导出计算$\frac{1}{\sqrt{a}}(a>0)$的牛顿程序，使公式中即无开方，又无除法运算。

4　当$f'(x)<0$，$f''(x)<0$时，论证切线法收敛定理。

5　设$m_1=\min\limits_{a\leqslant x\leqslant b}|f'(x)|$，$M_2=\max\limits_{a\leqslant x\leqslant b}|f''(x)|$，

试证明切线法有误差估计式：

$$|x_n-x^*|\doteq\left|\frac{f''(x_n)}{2f'(x_n)}\right|\cdot|x_n-x_{n-1}|^2$$

$$\leqslant\frac{M_2}{2m_1}|x_n-x_{n-1}|^2$$

6　设$f(x)=0$在$[a,b]$内有根x^*，$y=f(x)$在$[a,b]$上存在反函数$x=Q(y)$，试用$x=Q(y)$的泰劳公式导出：

（1）$x_{n+1}=x_n-\dfrac{f(x_n)}{f'(x_n)}$　（牛顿公式），

（2）$x_{n+1}=x_n-\dfrac{f(x_n)}{f'(x_n)}-\dfrac{f''(x_n)f^2(x_n)}{2[f'(x_n)]^3}$

（切比雪夫公式）。

7　由递推关系式

$$x_{K+1}-x_K\doteq\alpha(x_K-x_{K-1})^2$$

推导出牛顿法加快公式

$$\bar{x}_{K+1}=x_{K+1}+\frac{(\Delta x_K)^3}{(\Delta x_{K-1})^2}$$

其中α为非0常数，$\Delta x_K=x_{K+1}-x_K$。

8　试证明当$f(x)$在$[a,b]$上满足条件：

（1）$f(a)f(b)<0$，

（2）$f'(x)$，$f''(x)$连续，不变号，

（3）$|f'(c)|\geqslant|f(c)|/(b-a)$，其中$c$为$a$，$b$中使$\min\{|f'(a)|,|f'(b)|\}$达到的一个。

则对任意初值$x_0\in[a,b]$，牛顿法收敛。

9* 试导出用密切双曲线代替曲线$y=f(x)$得到的迭代程序为

$$x_{n+1}=x_n-\frac{2f'(x_n)f(x_n)}{2[f'(x_n)]^2-f''(x_n)f(x_n)}\qquad n=0,1,\cdots$$

〔提示：设密切双曲线为$F(x)=\dfrac{x+\alpha}{\beta x+r}$，且 $f(x_n)=F(x_n)$，$f'(x_n)=F'(x_n)$，$f''(x_n)=F''(x_n)$〕。

§5 一般迭代法

在前面学过的弦截法、切线法等，都是特定形式的迭代法，在本节我们将讨论一般形式的迭代法。

(一) 迭 代 程 序

总结前面那些具体迭代法的计算过程，就可以得出一般迭代法的思想。

设已知方程

$$f(x)=0 \tag{5.1}$$

在区间$[a, b]$内有根x^*，取初始近似 $x_0\in[a, b]$。

将方程（5.1）在$[a, b]$上同解变形为

$$x=\varphi(x) \tag{5.2}$$

假设$\varphi(x)$在$[a, b]$上连续，那么将x_0代入（5.2）的右端，计算得

$$x_1=\varphi(x_0)$$

作为x^*的第一近似值。

再将x_1代入（5.2）的右端，计算得

$$x_2=\varphi(x_1)$$

作为x^*的第二近似值。

这样继续下去，如果已算得x^*的第 n 个近似值x_n，将x_n代入（5.2）的右端，则得到x^*的第$n+1$个近似值

$$x_{n+1}=\varphi(x_n),\quad n=0, 1, \cdots \tag{5.3}$$

这样得到的序列$\{x_n\}$，如果在$[a, b]$内收敛于$\bar{x}$，则$\bar{x}$必为方程（5.2）的根，也为方程（5.1）的根。

事实上，对（5.3）两边取极限得

$$\bar{x} = \varphi(\bar{x}) \qquad (n\to\infty)$$

如果方程（5.2）在$[a, b]$内只有一个根x^*，则必有

$$\bar{x} = x^*$$

上述求方程近似根的方法，称为一般迭代法，（5.3）则为一般迭代法的迭代程序。

可以看出，一般迭代法的迭代程序构造的关键在于方程（5.1）在$[a, b]$上的同解变形，而此同解变形是多种多样的。

例如 方程$f(x)=0$ 可变形为：

$$x = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

$$x = x - af(x) \quad (a\text{为非零常数})$$

方程 $x^3-3x+1=0$

在$[0, 1]$上可同解变形为：

$$x = \frac{1}{3}(x^3+1)$$

或

$$x = \frac{3x-1}{x^2}$$

或

$$x = \sqrt[3]{3x-1}$$

等等。

（二）收敛性

由方程各种同解变形作出的迭代程序不一定都收敛，那么在什么条件下收敛？下述定理回答了这一问题。

定理 设方程（5.2）在$[a, b]$内有根x^*，$\varphi'(x)$在$[a, b]$上连续，且$\rho=\max\limits_{a\leq x\leq b}|\varphi'(x)|<1$，则方程（5.2）在$[a, b]$内有唯一根，对任意$x_0\in[a, b]$，由程序（5.3）确定的序列$\{x_n\}$收敛于$x^*$，当$\varphi'(x^*)\neq 0$时，其敛速为线性，并有误差估计式：

$$|x_n - x^*| \leqslant \frac{\rho}{1-\rho}|x_n - x_{n-1}| \tag{5.4}$$

证明 首先证方程（5.2）在$[a, b]$内有唯一根。采用反证法。假设方程在$[a, b]$内另有一根$\bar{x} \neq x^*$。则由

$$\bar{x} = \varphi(\bar{x}), \quad x^* = \varphi(x^*) \tag{5.5}$$

及中值定理得

$$\bar{x} - x^* = \varphi(\bar{x}) - \varphi(x^*) = \varphi'(\eta)(\bar{x} - x^*)$$

$$(\bar{x} - x^*)[1 - \varphi'(\eta)] = 0$$

其中η在$\bar{x}$和x^*之间。由于

$$\bar{x} \neq x^*$$

故必有 $\varphi'(\eta) = 1$

这与已知条件：

$$\rho = \max_{a \leqslant x \leqslant b}|\varphi'(x)| < 1$$

矛盾。

所以 $\bar{x} = x^*$

其次证$\{x_n\}$线性收敛于x^*。由（5.2）和（5.5）第二式得

$$x^* - x_n = \varphi(x^*) - \varphi(x_{n-1})$$

$$= \varphi'(\eta_{n-1})(x^* - x_{n-1}) \tag{5.6}$$

其中η_{n-1}在x^*和x_{n-1}之间。从而有

$$|x^* - x_n| \leqslant \rho|x^* - x_{n-1}| \leqslant \cdots \leqslant \rho^n|x^* - x_0|$$

又由于$\rho < 1$，所以

$$x_n \to x^* \quad (n \to \infty)$$

再由（5.6）得

$$\frac{|x^* - x_{n+1}|}{|x^* - x_n|} = |\varphi'(\eta_n)| \to |\varphi'(x^*)| \quad (n \to \infty)$$

故当$\varphi'(x^*) \neq 0$时，一般迭代法为线性敛速。

最后推导误差估计式（5.4）。由（5.6）得：

$$|x^* - x_n| \leqslant \rho|x^* - x_{n-1}| = \rho|x^* - x_n + x_n - x_{n-1}|$$

$$\leqslant \rho(|x^* - x_n| + |x_n - x_{n-1}|)$$

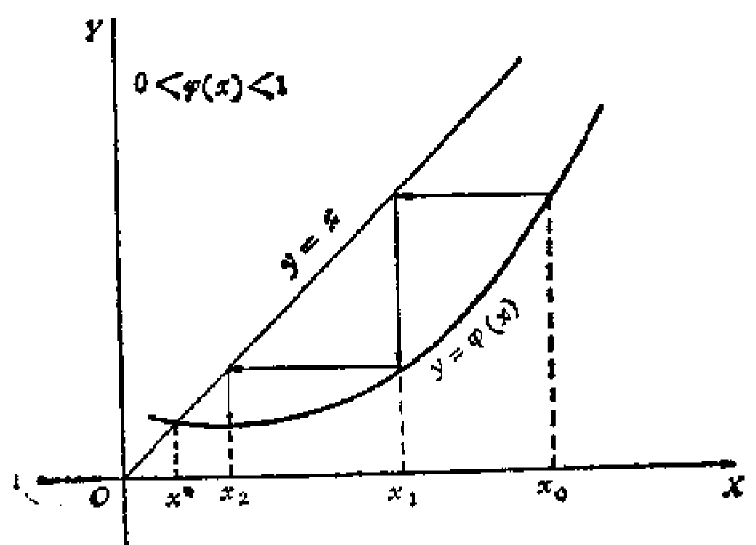
故有

$$(1-\rho)|x^* - x_n| \leqslant \rho|x_n - x_{n-1}|$$

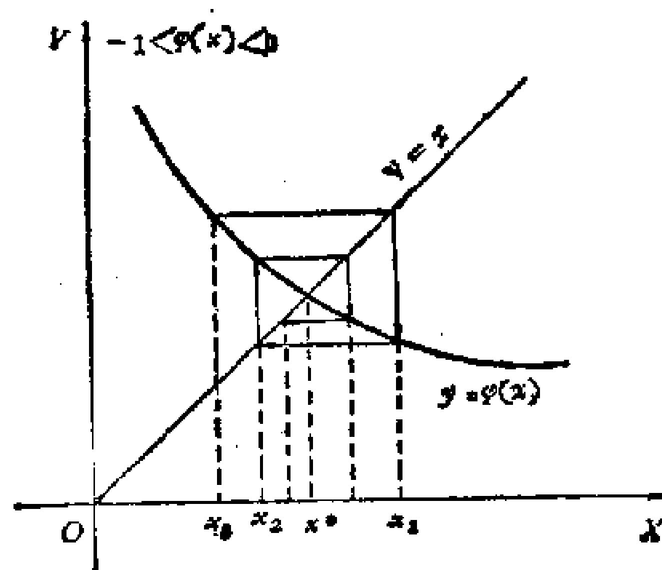
$$|x^* - x_n| \leqslant \frac{\rho}{1-\rho}|x_n - x_{n-1}|$$

证完。

一般迭代法当$\rho = \max\limits_{a\leqslant x\leqslant b}|\varphi'(x)| < 1$ 时收敛的几何解释如图2.7所示。



(a)



(b)

图 2.7

例 1　用一般迭代法求方程

$$2x-7-\lg x=0$$

的最大根（精确到10^{-4}）。

解　用画图来辅助确定方程最大根所在区间．把方程改写成：

$$2x-7=\lg x$$

分别作函数$y=2x-7$和$y=\lg x$的曲线，则二曲线交点的横坐标即为方程的根（见图2．8）。

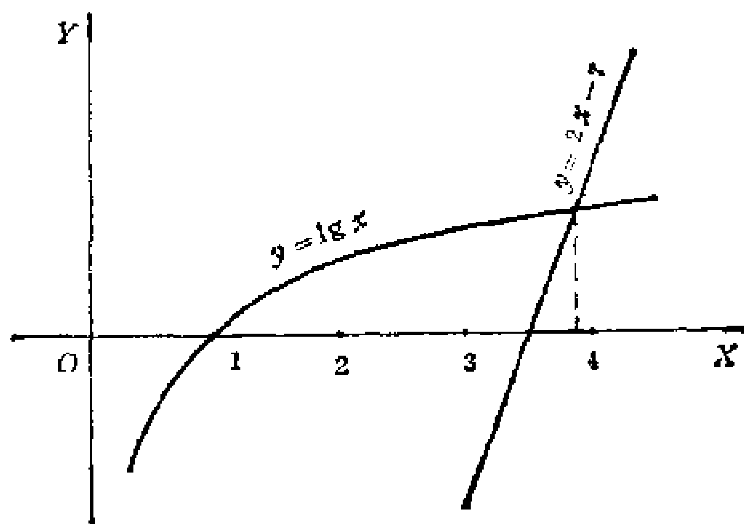


图　2.8

又因为　$f(3.5)=-\lg 3.5\doteq-0.544<0$，

$f(4)=1-\lg 4\doteq 0.398>0$，所以 $x^*\in[3.5,\ 4]$。

将原方程在区间[3.5，4]内作同解变形为

$$x=\frac{1}{2}(\lg x+7)=\varphi(x)$$

则有

$$\varphi'(x)=\frac{1}{2\ln 10}\cdot\frac{1}{x}$$

$$\rho=\max_{3.5\leq x\leq 4}|\varphi'(x)|\doteq 0.063<1$$

所以 $x_{n+1}=\frac{1}{2}(\lg x_n+7)$, $n=0, 1, \cdots$

收敛。

取 $x_0=3.8$，具体计算如下：

$$x_1=\frac{1}{2}(\lg 3.8+7)\doteq 3.78990$$

$$x_2=\frac{1}{2}(\lg 3.78990+7)\doteq 3.78931$$

$$x_3=\frac{1}{2}(\lg 3.78931+7)\doteq 3.78928$$

$$x_4=\frac{1}{2}(\lg 3.78928+7)\doteq 3.78928$$

所以，最大正根 $x^*\doteq 3.7893$。

例 2　用一般迭代法求方程

$$x^3-3x+1=0$$

的最小正根（精确到 10^{-6}）。

解　确定最小正根所在区间：

因为　$f(0)=1>0$, $f(0.5)=-0.375<0$,

所以　$x^*\in[0, 0.5]$.

将方程同解变形为

$$x=\frac{1}{3}(x^3+1)=\varphi(x)$$

因为 $\varphi'(x)=x^2$ 在 $[0, 0.5]$ 上为增函数，所以有

$$\rho=\max_{0\leqslant x\leqslant 0.5}|\varphi'(x)|=0.5^2<1$$

$$x_{n+1}=\frac{1}{3}(x_n^3+1), \quad n=0, 1, \cdots$$

收敛。

取 $x_0=0.25$，具体计算如下：

$$x_1=\frac{1}{3}(0.25^3+1)\doteq 0.3385417$$

$$x_2=\frac{1}{3}(0.3385417^3+1)\doteq 0.3462668$$

$$x_3=\frac{1}{3}(0.3462668^3+1)\doteq 0.3471725$$

$$x_4=\frac{1}{3}(0.3471725^3+1)\doteq 0.3472814$$

$$x_5=\frac{1}{3}(0.3472814^3+1)\doteq 0.3472946$$

$$x_6=\frac{1}{3}(0.3472946^3+1)\doteq 0.3472961$$

$$x_7=\frac{1}{3}(0.3472961^3+1)\doteq 0.3472963$$

所以　　$x^*\doteq 0.347296$。

（三）加 快 公 式

由于一般迭代法的收敛速度比较慢，下面我们给出两个加速收敛的简便公式。

1　由于

$$x^*-x_{n+1}=\varphi'(\eta_n)(x^*-x_n)$$

对于充分大的n，有

$$\varphi'(\eta_n)\doteq\varphi'(x_{n+1})=\alpha$$

则有

$$x^*-x_{n+1}\doteq\alpha(x^*-x_n) \tag{5.7}$$

$$x^*-x_{n+1}\doteq\frac{\alpha}{1-\alpha}(x_{n+1}-x_n)$$

$$x^*\doteq x_{n+1}+\frac{\alpha}{1-\alpha}(x_{n+1}-x_n)$$

我们取

$$\overline{x}_{n+1}=x_{n+1}+\frac{\alpha}{1-\alpha}(x_{n+1}-x_n) \tag{5.8}$$

(5.8) 就是所要求的加快公式。显然$\overline{x}_{n+1}$比x_{n+1}更靠近于

x^*.

例如，在例2中计算到x_4，取

$\alpha=\varphi'(x_4)\doteq 0.12$，则有

$$\overline{x_4}=x_4+\frac{\alpha}{1-\alpha}(x_4-x_3)$$

$$\doteq 0.3472814+\frac{0.12}{1-0.12}(0.3472814-0.3471725)$$

$$\doteq 0.3472963=x_7$$

2　在上述α的假设下，由（5.7）得

$$x^*-x_n\doteq\alpha(x^*-x_{n-1}) \tag{5.9}$$

（5.9）和（5.7）两端相减得

$$x_{n+1}-x_n\doteq\alpha(x_n-x_{n-1})$$

若令　$\Delta x_n=x_{n+1}-x_n$，则得

$$\alpha\doteq\frac{x_{n+1}-x_n}{x_n-x_{n-1}}=\frac{\Delta x_n}{\Delta x_{n-1}} \tag{5.10}$$

将（5.10）代入（5.8）得：

$$\overline{x}_{n+1}=x_{n+1}+\frac{(\Delta x_n)^2}{\Delta x_{n-1}-\Delta x_n} \tag{5.11}$$

（5.11）称为δ^2加快公式．它不需要计算$\varphi'(x_{n+1})$只需用三个相邻近似根x_{n-1}，x_n，x_{n+1}算出Δx_{n-1}，Δx_n 代入（5.11）即可。此加快公式适用于任何具有一阶敛速的迭代过程．

（5.11）中的$\overline{x}_{n+1}$显然比x_{n+1}更靠近x^*。

例如，在例2中已算出x_3，用（5.11）计算$\overline{x_3}$，由于

$$\Delta x_2=x_3-x_2\doteq 0.0009057$$

$$\Delta x_1=x_2-x_1\doteq 0.0077251$$

所以

$$\overline{x_3}=x_3+\frac{(\Delta x_2)^2}{\Delta x_1-\Delta x_2}\doteq 0.3471725+1.203\times 10^{-4}$$

$$=0.3472928\doteq x_5$$

习　题　2.5

1　用一般迭代法求下列方程最小正根（精确到10^{-3}）．

（1）$x^3-2x-5=0$，

（2）$x^5-10=0$，

（3）$x-tgx=0$，

（4）$2^x-4x=0$．

2　设$f(x)=0$在$[a,\ b]$内有根x^*，$f'(x)$在$[a,\ b]$上连续且不变号，试确定使程序：

$$x_{n+1}=x_n-\alpha f(x_n),\quad n=0,\ 1,\ \cdots$$

收敛的α取值范围．

3　试讨论简化牛顿程序：

$$x_{n+1}=x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_0)},\quad n=0,\ 1,\ \cdots$$

的收敛条件，并证明

$$|x_{n+1}-x^*|\leqslant\frac{|f'(x_0)|}{m_1}|x_{n+1}-x_n|$$

其中$m_1=\min\limits_{a\le x\le b}|f'(x)|$，$f(x)$在$[a,\ b]$内有唯一根$x^*$．

4　设$f(x)=0$在$[a,\ b]$内有单根，$f(x)$在$[a,\ b]$上有连续一、二阶导数，令

$$x_{n+1}=x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}=\varphi(x_n),\quad n=0,\ 1,\ \cdots$$

试讨论它的收敛条件．

5　将牛顿法作为一般迭代法，试讨论当$f'(x^*)\neq0$时，为平方收敛；当$f'(x^*)=0$时，为线性收敛，但修正程序：

$$x_{n+1}=x_n-2\frac{f(x_n)}{f'(x_n)},\quad n=0,\ 1,\ \cdots$$

仍为平方收敛．

6　某厂计划从1981年起每年增产相同百分数，到1985年

末使这期间总产量等于1981年产量的七倍，求每年增产的百分数。

§6 劈因子法

前几节讨论的都是求方程实根近似值的方法。本节将介绍可以用来求代数方程复根的劈因子法。

我们知道二次方程是容易求解的，因此，如果能分解出 n 次多项式 $f(x)$ 的一个二次因式，就等于找到了 $f(x)=0$ 的一对复根。

劈因子法就是可用来求实系数多项式二次因式的一个数值方法。

设实系数多项式为

$$f(x)=x^n+a_1x^{n-1}+\cdots+a_{n-1}x+a_n \tag{6.1}$$

而

$$x^2+px+q \tag{6.2}$$

是 $f(x)$ 的一个近似二次因式。

于是有

$$f(x)=(x^2+px+q)Q(x)+R_1x+R_2 \tag{6.3}$$

很明显，R_1，R_2 是 p，q 的函数，记作

$$R_1=R_1(p,\ q),\quad R_2=R_2(p,\ q)$$

而

$$Q(x)=x^{n-2}+b_1x^{n-3}+\cdots+b_{n-3}x+b_{n-2}$$

如果令 $p^*=p+\Delta p$，$q^*=q+\Delta q$，而

$$x^2+p^*x+q^*$$

为 $f(x)$ 的精确二次因式。

则有方程组：

$$\left.\begin{array}{l}R_1(p^*,q^*)=0\\R_2(p^*,q^*)=0\end{array}\right\} \tag{6.4}$$

为求 p^*，q^*，我们由泰劳公式得到（6. 4）的近似线性方程组：

$$\left.\begin{aligned}\frac{\partial R_1}{\partial p}\Delta p+\frac{\partial R_1}{\partial q}\Delta q+R_1(p,\ q)=0\\ \frac{\partial R_2}{\partial p}\Delta p+\frac{\partial R_2}{\partial q}\Delta q+R_2(p,\ q)=0\end{aligned}\right\}\tag{6.5}$$

若能由（6.5）解出 Δp，Δq，则$p+\Delta q$，$q+\Delta q$，必为p^*，q^*的更好的近似值.

为求Δp，Δq，我们需先求出系数R_1，R_2，$\frac{\partial R_1}{\partial p}$，$\frac{\partial R_1}{\partial q}$，$\frac{\partial R_2}{\partial p}$，$\frac{\partial R_2}{\partial q}$.

由（6.3）知R_1，R_2 为用x^2+px+q除 $f(x)$所得余式的二系数. 我们通过比较（6.3）两边的同次幂的系数得：

$$\left.\begin{aligned}&1=b_0\\ &a_1=b_1+pb_0\\ &a_2=b_2+pb_1+qb_0\\ &\quad\cdots\quad\cdots\quad\cdots\\ &a_{n-1}=R_1+pb_{n-2}+qb_{n-3}\\ &a_n=R_2+qb_{n-2}\end{aligned}\right\}\tag{6.6}$$

若记　$R_1=b_{n-1}$，$R_2=b_n+pb_{n-1}$，则（6.6）可简写为：

$$\left.\begin{aligned}&b_K=a_K-pb_{K-1}-qb_{K-2}\\ &b_{-1}=b_{-2}=0,\quad K=0,\ 1,\ \cdots,\ n\end{aligned}\right\}\tag{6.7}$$

由（6. 7）可求得R_1，R_2.

为求$\frac{\partial R_1}{\partial p}$，$\frac{\partial R_1}{\partial q}$，$\frac{\partial R_2}{\partial p}$，$\frac{\partial R_2}{\partial q}$，我们将(6. 3)对 p,q求偏导得：

$$\left.\begin{aligned}0=xQ(x)+(x^2+px+q)\frac{\partial Q}{\partial p}+\frac{\partial R_1}{\partial p}x+\frac{\partial R_2}{\partial p}\\ 0=Q(x)+(x^2+px+q)\frac{\partial Q}{\partial q}+\frac{\partial R_1}{\partial q}x+\frac{\partial R_2}{\partial q}\end{aligned}\right\}\tag{6.8}$$

若令

$$Q(x)=(x^2+px+q)H(x)+S_1x+S_2 \tag{6.9}$$

$$H(x)=x^{n-4}+C_1x^{n-5}+\cdots+C_{n-4},$$

则 $$xQ(x)=(x^2+px+q)xH(x)+S_1x^2+S_2x$$

$$=(x^2+px+q)[xH(x)+S_1]-(PS_1-S_2)x$$

$$-qS_1 \tag{6.10}$$

比较（6.8），（6.9），（6.10）可得：

$$\left.\begin{aligned}&-\frac{\partial R_1}{\partial q}=S_1,\ -\frac{\partial R_2}{\partial q}=S_2\\&+\frac{\partial R_1}{\partial p}=pS_1-S_2,\ +\frac{\partial R_2}{\partial p}=qS_1\end{aligned}\right\} \tag{6.11}$$

我们通过比较（6.9）两边同次幂系数得：

$$\left.\begin{aligned}&1=C_0\\&b_1=C_1+pC_0\\&b_2=C_2+pC_1+qC_0\\&\cdots\quad\cdots\quad\cdots\\&b_{n-3}=S_1+pC_{n-4}+qC_{n-5}\\&b_{n-2}=S_2+qC_{n-4}\end{aligned}\right\}$$

若记 $S_1=C_{n-3}$，$S_2=C_{n-2}+pC_{n-3}$，

$C_{n-1}=b_{n-1}-pC_{n-2}-qC_{n-3}$，则得

$$\left.\begin{aligned}&C_K=b_K-pC_{K-1}-qC_{K-2}\\&C_{-1}=C_{-2}=0,\quad K=0,\ 1,\ \cdots,\ n-1\end{aligned}\right\} \tag{6.12}$$

由（6.12）可求出S_1，S_2。再由（6.11）可求出

$$\frac{\partial R_1}{\partial p},\ \frac{\partial R_2}{\partial p},\ \frac{\partial R_1}{\partial q},\ \frac{\partial R_2}{\partial q}$$

这样一来，由（6.5）可写出关于 Δp，Δq 的方程组：

$$\left.\begin{aligned}&C_{n-2}\Delta p+C_{n-3}\Delta q=b_{n-1}\\&(C_{n-1}+pC_{n-2}-b_{n-1})\Delta p+(C_{n-2}+pC_{n-3})\Delta q\\&\qquad=b_n+pb_{n-1}\end{aligned}\right\} \tag{6.13}$$

若记

$$\delta=\begin{vmatrix}C_{n-2} & C_{n-3}\\ C_{n-1}-b_{n-1} & C_{n-2}\end{vmatrix}=C_{n-2}^2-(C_{n-1}-b_{n-1})C_{n-3},$$

则由（6.13）解得：

$$\left.\begin{aligned}\Delta p&=(b_{n-1}C_{n-2}-b_nC_{n-3})/\delta\\ \Delta q&=[b_nC_{n-2}-b_{n-1}(C_{n-1}-b_{n-1})]/\delta\end{aligned}\right\}\qquad(6.14)$$

我们若令$p=p_0$，$q=q_0$，

$$p_1=p_0+\Delta p_0,\quad q_1=q_0+\Delta q_0,$$

则p_1,q_1比p_0,q_0更接近于p^*,q^*。若重复上述过程可得到序列：$\{p_K\}$，$\{q_K\}$，直到满足精度要求为止。

下面我们来证明当$x^2+p^*x+q^*$的二根为互异单根，且p_0，q_0选得适当精确时，则迭代过程为平方收敛。

由（6.4）知，劈因子法等价于用牛顿法解非线性方程组：

$$\left.\begin{aligned}R_1(p,q)=0\\ R_2(p,q)=0\end{aligned}\right\}\qquad(6.15)$$

由牛顿法的收敛性定理知，只须证明$R_1(p,q)$，$R_2(p,q)$的雅可比矩阵

$$\mathbf{J}(p,q)=\begin{pmatrix}\dfrac{\partial R_1}{\partial p} & \dfrac{\partial R_1}{\partial q}\\ \dfrac{\partial R_2}{\partial p} & \dfrac{\partial R_2}{\partial q}\end{pmatrix}$$

的行列式$|\mathbf{J}(p,q)|$在(p^*,q^*)点不等于零。

由假设 $x^2+p^*x+q^*=0$ 的二根为互异单根，由(6.8) 有

$$\left.\begin{aligned}x_K^*\frac{\partial R_1}{\partial p}(p^*,q^*)+\frac{\partial R_2}{\partial p}(p^*,q^*)&=-x_K^*\,Q(x_K^*)\\ x_K^*\frac{\partial R_1}{\partial q}(p^*,q^*)+\frac{\partial R_2}{\partial q}(p^*,q^*)&=-Q(x_K^*)\\ K&=1,2\end{aligned}\right\}\qquad(6.16)$$

又由$Q(x_K^*)\neq0$，所以有：

$$\begin{pmatrix}\dfrac{\partial R_1}{\partial p}(p^*,q^*)\\ \dfrac{\partial R_2}{\partial p}(p^*,q^*)\end{pmatrix}=\begin{bmatrix}x_1^* & 1\\ x_2^* & 1\end{bmatrix}^{-1}\cdot\begin{bmatrix}-x_1^*Q(x_1^*)\\ -x_2^*Q(x_2^*)\end{bmatrix}$$

K	p_k	q_k	上行 $b_i^{(k)}$ $(0\leqslant i\leqslant n)$ 下行 $C_j^{(k)}$ $(0\leqslant j\leqslant n-1)$	Δp_k	Δq_k	σ_k
0	-1.6	1.3	1, -6.4, 27.46, -9.744, -1.2884 1, -4.8, 18.48, 26.064	-0.3628	0.6333	513.3888
1	-1.9628	1.9333	1, -6.0372, 25.2169, -0.8325, 0.3859 1, -4.0744, 15.2864, 37.0487	-0.03684	0.06607	388.0172
2	-1.9996	1.9994	1, -6.0004, 25.0022, -0.0084, -0.0022 1, -4.0008, 15.0028, 37.9904	-0.0004	0.0007	377.1096
3	-2.0000	2.0001	1, -6.0000, 24.9999, 0.0004, -0.0015 1, -4.0000, 14.9998, 38.00	0	-0.0001	376.9924
4	-2.0000	2.0000	1, -6.0000, 25.0000, 0, 0 1, -4.0000, 15.0000, 3800	0	0	

$$\begin{pmatrix} \dfrac{\partial R_1}{\partial q}(p^*,q^*) \\ \dfrac{\partial R_2}{\partial q}(p^*,q^*) \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} x_1^* & 1 \\ x_2^* & 1 \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} -Q(x_1^*) \\ -Q(x_2^*) \end{bmatrix}$$

$$J(p^*,q^*) = \begin{bmatrix} x_1^* & 1 \\ x_2^* & 1 \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} -x_1^*Q(x_1^*) & -Q(x_1^*) \\ -x_2^*Q(x_2^*) & -Q(x_2^*) \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} x_1^* & 1 \\ x_2^* & 1 \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} -Q(x_1^*) & 0 \\ 0 & -Q(x_2^*) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1^* & 1 \\ x_2^* & 1 \end{bmatrix}$$

故有

$$|J(p^*,q^*)| = \begin{vmatrix} -Q(x_1^*) & 0 \\ 0 & -Q(x_2^*) \end{vmatrix} \neq 0$$ 证完。

例1 求 $f(x)=x^4-8x^3+39x^2-62x+50$的二次因式（精确到$10^{-4}$）。

解 我们用尾部二次式，即

$x^2-1.6x+1.3$

作为初始近似二次因式，按劈因子法计算过程列表计算如下：（见58页表）

因此得 $f(x)$ 的一个二次因式为：

$\varphi(x)=x^2-2x+2$

习 题 2.6

1 用劈因子法求下列多项式的二次因式(精确到10^{-4})。

（1）$x^4+7x^3+24x^2+25x-15=0$，

（2）$x^4+39x^3+958x^2-1080x-2000=0$。

2 试导出劈一次因子的计算公式，并证明与牛顿法等价，具有平方敛速。

第三章　线性代数计算法

§1 引　　言

在国民经济、工程技术和科学实验中，遇到许多关于线性代数计算问题．目前应用日益广泛，内容更为丰富，它已成为计算数学中一个重要分支．例如，大型水坝应力计算，线性规划，回归分析，弹性地基振动计算，最终都要直接或间接地归结为含有多个未知数线性方程组求解问题．虽然解线性代数方程组有著名的克莱姆法则，但阶数稍高一点，比如20阶，其运算量之大达到惊人的程度．所以寻求计算量小，存储少，算法简单，并能保证达到所要精度的算法，就显得很有必要．

在线性代数计算法里需要解决的主要问题有二：

一　求高阶线性代数方程组的解；

二　求矩阵的特征值及特征向量．

解决问题的方法有两类：

第一，若没有舍入误差，用有限回算术运算，就能得出所给问题的精确解的方法，称为精确法或直接法．如加减消元法，克莱姆方法等等．

第二，从一个初始向量开始，通过某种手续构造一个向量的无限序列，当序列收敛时，其极限为所给问题的精确解，这种方法称为迭代法．

本章，我们将介绍几个常用的基本的解线性代数方程组的方法及其有关理论，以及求矩阵特征值特征向量的方法．

§2 消 元 法

解线性代数方程组的消元法，它的基本作法就是利用方程组之间的同解变换，每次消去一个未知数，化为低一阶的线性方程组的消元问题，这样一次一次作下去，直到最后得到一元一次方程为止，然后逐次回代求出全部解。由消元做法的不同而产生不同程序，本节只介绍简单消元法、列主元及全主元消元法三种程序。

（一）简单消元法

设已知 n 阶线性方程组

$$\left.\begin{array}{l} a_{11}^{(0)}x_1 + a_{12}^{(0)}x_2 + \cdots + a_{1n}^{(0)}x_n = b_1^{(0)} \\ a_{21}^{(0)}x_1 + a_{22}^{(0)}x_2 + \cdots + a_{2n}^{(0)}x_n = b_2^{(0)} \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ a_{n1}^{(0)}x_1 + a_{n2}^{(0)}x_2 + \cdots + a_{nn}^{(0)}x_n = b_n^{(0)} \end{array}\right\} \tag{3.1}$$

简单消元法的第一步是设 $a_{11}^{(0)}\neq 0$，然后用第 i 个方程 $(i=2,3,\cdots,n)$ 各系数减去第一个方程相应系数的 $a_{i1}^{(0)}/a_{11}^{(0)}$ 倍 $(i=2,\ 3,\cdots,\ n)$，则得与（3.1）等价的方程组

$$\left.\begin{array}{l} a_{11}^{(0)}x_1 + a_{12}^{(0)}x_2 + \cdots + a_{1n}^{(0)}x_n = b_1^{(0)} \\ \qquad\qquad a_{22}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{2n}^{(1)}x_n = b_2^{(1)} \\ \qquad\qquad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \qquad\qquad a_{n2}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{nn}^{(1)}x_n = b_n^{(1)} \end{array}\right\} \tag{3.2}$$

其中 $$a_{ij}^{(1)} = a_{ij}^{(0)} - a_{i1}^{(0)}\frac{a_{1j}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}},\quad i=2,\ 3,\ \cdots,\ n$$

$$j=1,\ 2,\ \cdots,\ n$$

$$b_i^{(1)} = b_i^{(0)} - a_{i1}^{(0)}\frac{b_1^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}$$

同样，对（3.2）的第二个方程，当 $a_{22}^{(1)}\neq 0$ 时，则用第

i 个方程（$i=3, 4, \cdots, n$）各系数减去第二个方程相应系数的 $a_{i2}^{(1)}/a_{22}^{(1)}$ 倍（$i=3, 4, \cdots, n$），即得与(3.2)等价的方程组

$$\left.\begin{aligned}
a_{11}^{(0)}x_1+a_{12}^{(0)}x_2+a_{13}^{(0)}x_3+\cdots+a_{1n}^{(0)}x_n&=b_1^{(0)}\\
a_{22}^{(1)}x_2+a_{23}^{(1)}x_3+\cdots+a_{2n}^{(1)}x_n&=b_2^{(1)}\\
a_{33}^{(2)}x_3+\cdots+a_{3n}^{(2)}x_n&=b_3^{(2)}\\
\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots&\\
a_{n3}^{(2)}x_3+\cdots+a_{nn}^{(2)}x_n&=b_n^{(2)}
\end{aligned}\right\}\tag{3.3}$$

其中 $a_{ij}^{(2)}=a_{ij}^{(1)}-a_{i2}^{(1)}\dfrac{a_{2j}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}$, $i=3,4,\cdots,n$, $j=2,3,\cdots,n$

$$b_i^{(2)}=b_i^{(1)}-a_{i2}^{(1)}\frac{b_2^{(1)}}{a_{22}^{(1)}},\ i=3,\ 4,\ \cdots,\ n$$

如此下去，经 n 次消元之后，把(3．1)化成与之等价的方程组

$$\left.\begin{aligned}
a_{11}^{(0)}x_1+a_{12}^{(0)}x_2+a_{13}^{(0)}x_3+\cdots+a_{1n}^{(0)}x_n&=b_1^{(0)}\\
a_{22}^{(1)}x_2+a_{23}^{(1)}x_3+\cdots+a_{2n}^{(1)}x_n&=b_2^{(1)}\\
a_{33}^{(2)}x_3+\cdots+a_{3n}^{(2)}x_n&=b_3^{(2)}\\
\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots&\\
a_{nn}^{(n-1)}x_n&=b_n^{(n-1)}
\end{aligned}\right\}\tag{3.4}$$

从（3.1）～（3.4）叫做消元过程，（3.4）的系数阵是上三角形阵，很容易求解．由（3.1）～（3.4）的计算公式如下：

$$\left.\begin{aligned}
a_{ij}^{(k)}&=a_{ij}^{(k-1)}-a_{ik}^{(k-1)}\times a_{kj}^{(k-1)}/a_{kk}^{(k-1)},\ i=k+1,\cdots,n\\
&\qquad j=k,\cdots,n\\
b_i^{(k)}&=b_i^{k-1}-a_{ik}^{(k-1)}\times b_k^{(k-1)}/a_{kk}^{(k-1)},\ k=1,2,\cdots,n-1
\end{aligned}\right\}\tag{3.5}$$

对（3.4）求解，得：

$$\left.\begin{aligned}
x_n&=b_n^{(n-1)}/a_{nn}^{(n-1)}\\
x_{n-1}&=(b_{n-1}^{(n-2)}-a_{n-1,n}^{(n-2)}x_n)/a_{n-1,n-1}^{(n-2)}\\
\cdots&\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\\
x_1&=(b_1^{(0)}-a_{12}^{(0)}x_2-\cdots-a_{1n}^{(0)}x_n)/a_{11}^{(0)}
\end{aligned}\right\}$$

称回代过程，计算公式为：

$$
\left.\begin{aligned}
x_n &= b_n^{(n-1)}/a_{nn}^{(n-1)} \\
x_i &= \Big(b_i^{(i-1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i-1)} x_j\Big)/a_{ii}^{(i-1)} \\
& \qquad i = n-1,\ n-2,\ \cdots,\ 1
\end{aligned}\right\} \tag{3.6}
$$

注意在上述等价变换过程中，我们总是约定

$a_{11}^{(0)} \neq 0$,$a_{22}^{(1)} \neq 0$, …, $a_{nn}^{(n-1)} \neq 0$。

例 1 用简单消元法解方程组

$$
\left.\begin{aligned}
2x_1 + 3x_2 + 4x_3 &= 6 \\
3x_1 + 5x_2 + 2x_3 &= 5 \\
4x_1 + 3x_2 + 30x_3 &= 32
\end{aligned}\right\}
$$

解 为明确起见，列表计算如下：

		x_1	x_2	x_3	右端	说明
	Ⅰ₁	2	3	4	6	$l_{21}=3/2$
Ⅰ	Ⅰ₂	3	5	2	5	$l_{31}=4/2=2$
	Ⅰ₃	4	3	30	32	
	Ⅱ₁	2	3	4	6	$l_{32}=-3/0.5$
	Ⅱ₂		0.5	−4	−4	$(Ⅰ_2)-l_{21}\times(Ⅰ_1)=(Ⅱ_2)$
	Ⅱ₃		−3	22	20	$(Ⅰ_3)-l_{31}\times(Ⅰ_1)=(Ⅱ_3)$
	Ⅲ₁	2	3	4	6	
Ⅲ	Ⅲ₂		0.5	−4	−4	
	Ⅲ₃			−2	−4	$(Ⅱ_3)-l_{32}\times(Ⅱ_2)=(Ⅲ_3)$
	Ⅳ₁	1			−13	$[Ⅲ_1-3\times(Ⅳ_2)-4\times Ⅳ_3]/2$
Ⅳ	Ⅳ₂		1		8	$[Ⅲ_2+4\times(Ⅳ_3)]/0.5$
	Ⅳ₃			1	2	$(Ⅲ_3)/(-2)$

所求方程组的解是：

$$x_1=-13,\ x_2=8,\ x_3=2$$

可以看出，方程组Ⅱ的系数阵乃是上三角阵

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 0 & 0.5 & -4 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}$$

（二）列主元消元法

简单消元法，每步都假定了$a_{ii}^{(i-1)}\neq 0$，如果在第 k 步$a_{kk}^{(k-1)}=0$，就无法进行下去了，这时如果把方程次序交换一下位置，消元过程就可以进行，这就产生了列主元消元法。

它的具体做法，就是在进行第k步消元$(k=1,2,\cdots,n)$时，对第 k 列选取绝对值最大的元素 $a_{i_k,k}^{(k-1)}$ 称为主元，即

$$|a_{i_k,k}^{(k-1)}|=\max_{k\le i\le n}|a_{i,k}^{(k-1)}|$$

称主元所在方程为主方程，然后把主方程 i_k 与第 k 个方程交换位置，（当 $i_k=k$ 时，不用交换）再按简单消元法消元。

例 2　用列主元消元法解方程组

$$\left.\begin{aligned} x_1+2x_2+3x_3&=1 \\ 5x_1+4x_2+10x_3&=0 \\ 3x_1-0.1x_2+x_3&=2 \end{aligned}\right\}$$

解　列表计算如下：

		x_1	x_2	x_3	右端	说　　明
	(Ⅰ₁)	1	2	3	1	列主元为5
Ⅰ	(Ⅰ₂)	5	4	10	0	(Ⅰ₂)为主方程
	(Ⅰ₃)	3	-0.1	1	2	交换(Ⅰ₁),(Ⅰ₂)位置，再计算
	(Ⅱ₁)	5	4	10	0	$l_{21}=1/5$, $l_{31}=3/5$
Ⅱ	(Ⅱ₂)		1.2	1	1	$(Ⅰ_1)-l_{21}\times(Ⅰ_2)=(Ⅱ_2)$
	(Ⅱ₃)		-2.5	-5	2	$(Ⅰ_3)-l_{31}\times(Ⅰ_2)=(Ⅱ_3)$

		x_1	x_2	x_3	右端	说　　　明
	(Ⅲ₁)	5	4	10	0	列主元为−2.5，(Ⅱ₃)为主方程
Ⅲ	(Ⅲ₂)		−2.5	−5	2	$l_{32}=-1.2/2.5$
	(Ⅲ₃)			−1.4	1.96	$(Ⅱ_2)-l_{32}\times(Ⅱ_3)=(Ⅲ_3)$
	(Ⅳ₁)	1			1.2	$[(Ⅲ_1)-4\times(Ⅳ_2)-10\times Ⅳ_3]/5$
Ⅳ	(Ⅳ₂)		1		2	$[(Ⅲ_2)+5\times Ⅳ_3]/(-2.5)$
	(Ⅳ₃)			1	−1.4	$(Ⅲ_3)/(-1.4)$

故所求方程组的解是：

$$x_1=1.2,\ x_2=2,\ x_3=-1.4$$

（三）全主元消元法

全主元消元法与列主元消元法基本相同．只是在第 k 步消元时($k=1,2,\cdots,n$)，把对第 k 列选主元的步骤改成对所剩第 $k,k+1,\cdots,n$ 行和列，从这$(n-k)^2$个数中选取绝对值最大的元素 $a_{i_k,j_k}^{(k-1)}$，即

$$|a_{i_k,j_k}^{(k-1)}|=\max_{k\leq i,j\leq n}\{|a_{i,j}^{(k-1)}|\} \qquad (3.7)$$

称主元，主元所在的行叫主行，主元所在的列叫主列．把主行与 k 行交换，主列与 k 列交换，然后再按简单消元法消元．

全主元消元法的优点在于只要方程组的系数阵非奇异即可使用．此外在计算过程中的舍入误差是可控制的，即是数值稳定的．因此引起了广泛使用者的兴趣，但选主元比较麻烦，需要占用较多的机器时间．

例 3　用全主元消元法解例 2 的方程组．

解　主元为10，交换第二个方程与第一个方程的位置，再交换第一列与第三列，则得方程组

$$\begin{cases} \boxed{10}\, x_3 + 4x_2 + 5x_1 = 0 \\ 3x_3 + 2x_2 + x_1 = 1 \\ x_3 - 0.1x_2 + 3x_1 = 2 \end{cases}$$

消去第二、第三方程的未知量x_3，得

$$\begin{cases} 10x_3 + 4x_2 + 5x_1 = 0 \\ 0.8x_2 - 0.5x_1 = 1 \\ -0.5x_2 + \boxed{2.5}\, x_1 = 2 \end{cases}$$

在二、三两个方程中主元为 $\boxed{2.5}$，交换此两个方程的位置，再交换第三列与第二列，得方程组：

$$\begin{cases} 10x_3 + 5x_1 + 4x_2 = 0 \\ 2.5x_1 - 0.5x_2 = 2 \\ -0.5x_1 + 0.8x_2 = 1 \end{cases}$$

消去第三个方程中的未知量x_1，得

$$\begin{cases} 10x_3 + 5x_1 + 4x_2 = 0 \\ 2.5x_1 - 0.5x_2 = 2 \\ \boxed{0.7}\, x_2 = 1.4 \end{cases}$$

消元过程已结束，故此方程组的解为：

$$x_2 = 2,\ x_1 = 1.2,\ x_3 = -1.4$$

习　题　3.2

1　用简单消元法、列主元消元法、全主元消元法解下列方程组

(1) $\begin{pmatrix} 2 & 3 & 5 \\ 3 & 4 & 7 \\ 1 & 3 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 6 \\ 5 \end{pmatrix}$

(2) $\begin{pmatrix} 2 & -4 & 2 & -4 \\ -4 & 10 & 2 & 5 \\ 2 & 2 & 12 & -5 \\ 4 & 5 & -5 & 12 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ -5 \\ -2 \\ -4 \end{pmatrix}$

2　设实对称正定矩阵 $A=(a_{ij})$，求证：

（1）对任意 $i \neq j$，都有 $a^2_{ij} < a_{ii}\ a_{jj}$。

（2）A的主元必在对角线上。

§3　消元法与矩阵分解

（一）在简单消元法中，由(3.1)～(3.4)消元过程中，我们主要反复用一个数乘以某方程加到另一方程上去，我们熟知，这就是高等代数中用消元阵连续左乘矩阵A的结果。

所谓消元阵，是指形如

$$L_k = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ -\frac{a_{k+1,k}}{a_{kk}} & 1 & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \\ -\frac{a_{nk}}{a_{kk}} & 0 & & 1 \end{pmatrix}$$

的阵。

用L_k左乘A，一般只影响矩阵A的第 $k+1$ 行到第 n 行，比如

$$L_1 A = \begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ -\frac{a_{21}}{a_{11}} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ -\frac{a_{n1}}{a_{11}} & 0 & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ a_{21}^{(0)} & a_{22}^{(0)} & \cdots & a_{2n}^{(0)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1}^{(0)} & a_{n2}^{(0)} & \cdots & a_{nn}^{(0)} \end{pmatrix}$$

$$
=\begin{pmatrix}
a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\
0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
0 & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)}
\end{pmatrix}
$$

这样继续用 L_2，L_3，…，L_{n-1} 左乘A，则得

$$L_{n-1}\ L_{n-2}\cdots L_2\ L_1\ A=R$$

其中 R为上三角阵

则令

$$L^{-1}=L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_2L_1$$

则由

$$L^{-1}A=R$$

得

$$A=LR \tag{3.8}$$

很容易写出 L的明显表示式为

$$
L=\begin{pmatrix}
1 & & & 0 \\
\dfrac{a_{21}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}} & 1 & \ddots & \\
\vdots & \vdots & \ddots & \\
\dfrac{a_{n1}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}} & \dfrac{a_{n2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} \cdots & \dfrac{a_{n,n-1}^{(n-2)}}{a_{n-1,n-1}^{(n-2)}} & 1
\end{pmatrix}
$$

它是一个对角线为 1 的单位下三角阵。

由(3.8)知，简单消元法实质是把矩阵A分解成单位下三角阵与上三角阵之积，简称为 $L\cdot R$ 分解。

如果线性方程组的系数矩阵A实现了 LR 分解，则方程组的求解就变得非常容易了，这是因为(3.1)可看作求解具有三

角阵方程组

$$L \cdot y = b \tag{3.9}$$

$$R \cdot x = y \tag{3.10}$$

由(3.9)求出 y，代入(3.10)就得到 x 值。

那么在什么条件下矩阵A才有 LR 分解，下面进行具体分析：

引理 1　n 阶矩阵A与阵 $L^{-1}A$的相应主子式相等。

证　设

$$A = \begin{pmatrix} A_k & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}, \quad L^{-1} = \begin{pmatrix} L_k & O \\ H & L_{n-k,\, n-k} \end{pmatrix}$$

其中 A_k 为A的 k 阶主子矩阵，L_k 为L^{-1}的 k 阶单位下三角主子矩阵。

因为

$$\begin{pmatrix} L_k & 0 \\ H & L_{n-k,\, n-k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_k & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_k & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix}$$

则　　$L_k A_k = B_k$

B_k 为以 $a_{kk}^{(k-1)}$ 为对角元的上三角阵，因为

$|L_k| = 1$

所以

$$|A_k| = |B_k| = a_{11}^{(0)} a_{22}^{(1)} \cdots a_{kk}^{(k-1)} \quad \text{证完。}$$

推论 1　阵A的 k 阶主子式$\neq 0$ 的充要条件是$a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$。

$k = 1, 2, \cdots, n$

定理 1　设 $\det(A_k) \neq 0$①，$(k = 1, 2, \cdots, n)$，则存在唯一的单位下三角阵L与上三角阵R，使

$$A = L \cdot R$$

证明　设

---

① $\det(A_k) \neq 0$ $(k = 1, 2, \cdots, n)$ 表示n阶行列式的各阶主子式不等于零。

$$A=\begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ a_{21}^{(0)} & a_{22}^{(0)} & \cdots & a_{2n}^{(0)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1}^{(0)} & a_{n2}^{(0)} & \cdots & a_{nn}^{(0)} \end{pmatrix}=A^{(0)}$$

因为 $a_{11}^{(0)}\neq 0$，所以有

$$L_1A^{(0)}=\begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{pmatrix}=A^{(1)}$$

今假定已作出

$$L_{k-1}A^{(k-2)}=\begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1,k-1}^{(0)} & a_{1k}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ 0 & \ddots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & a_{k-1,k-1}^{(k-2)} & a_{k-1,k}^{(k-2)} & \cdots & a_{k-1,n}^{(k-2)} \\ \vdots & & & 0 & a_{kk}^{(k-1)} & \cdots & a_{kn}^{(k-1)} \\ \vdots & & & \vdots & \vdots & & \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & a_{nk}^{(k-1)} & \cdots & a_{nn}^{(k-1)} \end{pmatrix},$$

$$=A^{(k-1)}$$

由假定 $\det(A_k)\neq 0$，由推论 1 知 $a_{kk}^{(k-1)}\neq 0$，则存在 L_k，使

$$L_kA^{(k-1)}=A^{(k)}$$

这样继续做下去，当 $K=n-1$ 时，有

$$L_{n-1}\ A^{(n-2)}=\begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ & & \ddots & \vdots \\ 0 & & & a_{nn}^{(n-1)} \end{pmatrix}=R$$

从而得

$$L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_2L_1A=R$$

$$A=L_1^{-1}L_2^{-1}\cdots L_{n-1}^{-1}R=LR$$

其中

$$
L = L_1^{-1} L_2^{-1} \cdots L_{n-1}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ \dfrac{a_{21}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}} & 1 & \ddots & \\ \vdots & \vdots & & \\ \dfrac{a_{n1}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}} & \dfrac{a_{n2}^{(0)}}{a_{22}^{(1)}} \cdots & \dfrac{a_{n\,n-1}^{(n-2)}}{a_{n-1\,n-1}^{(n-2)}} & 1 \end{pmatrix}
$$

下面证明分解的唯一性。用反证法，若另有分解

$$A = \widetilde{L}U, \quad \widetilde{L} \neq L$$

则

$$A = LR = \widetilde{L}U$$

由于A非奇异，故L及U也非奇异，所以

$$RU^{-1} = L^{-1}\widetilde{L}$$

而$L^{-1}\widetilde{L}$为单位下三角阵，RU^{-1} 为上三角阵，故上式成立的充要条件是

$$RU^{-1} = L^{-1}\widetilde{L} = I$$

从而有　$R = U$，　$L = \widetilde{L}$　证完。

又因为　$R = DU$

所以　　$A = LDU$

其中D为对角阵，U为单位上三角阵。

推论 1：若 $\det(A_k) \neq 0$ $(k = 1, 2, \cdots, n)$ 则$A = LDU$分解为唯一的。

应当注意，如果对三角阵 L、R 的对角元没有什么要求时，分解式 $A = LR$ 并不是唯一的，因为若设D为任一n阶非奇异对角阵，则

$$A = LR = LDD^{-1}R = (LD)(D^{-1}R) = \overline{L}\,\overline{R}$$

这是两个不同的分解。

（二）列主元消去法

首先引进置换阵的概念：我们称每一行及每一列都有一个元素等于1，而其他所有元素等于0的方阵为置换阵，P_{rs} 表示单位矩阵 I 的第 r 行与第 s 行交换得到的置换阵。$P_{rs}A$ 就使 A 的第 r 行与第 s 行进行了交换。

定理2　A 为非奇异阵，则存在置换阵 P，元素绝对值不大于1的单位下三角阵 L 和上三角阵 R，使

$$PA = L\cdot R$$

成立.

证明　因为 $\det(A)\neq 0$，在第一列中存在主元 $a_{i_1 1}^{(0)}\neq 0$ $(i_1\geq 1)$ 若 $i_1\neq 1$，将 A 的 i_1 行与第1行交换. 并进行消元，即存在置换阵 P_1 和消元阵 L_1，使

$$L_1P_1A = A^{(1)} \tag{3.11}$$

此时 $A^{(1)}$ 中第一列除 $a_{i_1 1}\neq 0$ 外，其余元素全为0。因为 $\det(L_1)=1$，$\det(P_1)=-1$，所以有 $\det(A^{(1)})\neq 0$，于是在第二列中选主元 $a_{i_2 2}^{(1)}\neq 0$，进行置换，消元，即存在 P_2、L_2 使

$$L_2P_2A^{(1)} = A^{(2)} \tag{3.12}$$

类似的过程，做下去直到 $n-1$ 步时，主元 $a_{i_{n-1},n-1}^{(n-2)}\neq 0$，则存在 P_{n-1}、L_{n-1} 使

$$L_{n-1}P_{n-1}A^{(n-2)} = A^{(n-1)} = R \tag{3.13}$$

其中 R 为上三角阵，最后将 (3.11) $A^{(1)}$ 代入 (3.12) 中，再将 (3.12) $A^{(2)}$ 代入下一个递推公式中，如此下去一直把 $A^{(n-2)}$ 代入 (3.13) 中，得

$$L_{n-1}P_{n-1}\cdots L_2P_2L_1P_1A = R$$

或

$$A = P_1L_1^{-1}P_2L_2^{-1}\cdots P_{n-1}L_{n-1}^{-1}R \tag{3.14}$$

根据置换阵性质 $P_k^{-1}=P_k$ (3.14) 可改写为

$$P_{n-1}P_{n-2}\cdots P_2P_1A = (P_{n-1}\cdots P_2L_1^{-1}P_2\cdots P_{n-1})\times$$
$$\times(p_{n-1}\cdots P_3L_2^{-1}P_3\cdots P_{n-1})\times(P_{n-1}\cdots P_4L_3^{-1}P_4\cdots P_{n-1})\cdots$$
$$(P_{n-1}L_{n-2}^{-1}P_{n-1})L_{n-1}^{-1}R$$

$$= \widetilde{L}_1 \widetilde{L}_2 \cdots \widetilde{L}_{n-1} R = LR \tag{3.15}$$

其中

$$P_{n-1} P_{n-2} \cdots P_2 P_1 = P$$

$$\widetilde{L}_k = P_{n-1} P_{n-2} \cdots P_{k+1} L_k^{-1} P_{k+1} \cdots P_{n-1}, \quad k = 1, 2, \cdots, n-1$$

$$\widetilde{L}_1 \widetilde{L}_2 \cdots \widetilde{L}_{n-1} = L$$

由$\widetilde{L}_k$的构成可知，它是单位下三角阵L_k^{-1}第k列对角线以下的元素行与列交换而得。因此$\widetilde{L}_k$是单位下三角阵。所以

$$\prod_{k=1}^{n-1} \widetilde{L}_k = L$$

也是单位下三角阵，且对角线以下的元素绝对值不大于1。

证完。

用置换阵左乘A只交换矩阵A的两行，右乘A，只交换矩阵A的两列。

全主元消元法与列主元消元法的区别只在于除交换行外还对列进行交换，于是可得，对非奇异矩阵A的全主元消元法的三角分解定理如下：

定理 3 A为非奇异阵，存在置换阵P和Q，以及元素绝对值不大于1的单位下三角阵L和上三角阵R，使

$$PAQ = LR$$

即全主元是对PAQ进行三角分解。

例 作出下列矩阵的LR分解

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 3 & 5 & 2 \\ 4 & 3 & 30 \end{pmatrix}$$

解 $l_{21} = 3/2$，$l_{31} = 4/2 = 2$，$l_{32} = -3/0.5$代入(3.8)，得

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3/2 & 1 & 0 \\ 2 & -3/0.5 & 1 \end{pmatrix}$$

而

$$R=\begin{pmatrix}2 & 3 & 4\\0 & 0.5 & -4\\0 & 0 & -2\end{pmatrix}$$

所以

$$\begin{pmatrix}2 & 3 & 4\\3 & 5 & 2\\4 & 3 & 30\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\3/2 & 1 & 0\\0 & -3/0.5 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2 & 3 & 4\\0 & 0.5 & -4\\0 & 0 & -2\end{pmatrix}$$

习　　题　3.3

1　用简单消元法作出下列矩阵的$\boldsymbol{LR}$分解，和$\boldsymbol{LDU}$分解（$\boldsymbol{L}$为单位下三角阵，$\boldsymbol{U}$为单位上三角阵，$\boldsymbol{D}$为对角阵）。

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}2 & -1 & -1\\1 & 2 & 0\\1 & 0 & 3\end{pmatrix}$$

2　设$\boldsymbol{A}$是n阶对称正定矩阵，求证$\boldsymbol{A}$可唯一地分解为

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^T$$

其中$\boldsymbol{L}$为下三角阵，并将下列矩阵分解为$\boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^T$形式：

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}2 & -1 & -1\\-1 & 2 & 0\\-1 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

3　证明单位下三角阵的逆、积还是单位下三角阵。

§4　紧凑格式与改进平方根法

设n阶方程组

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b} \tag{4.1}$$

的系数阵非奇异

$$A=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix},\quad x=\begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix},\quad b=\begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

当阵A的各阶主子式都不为0时，则存在单位下三角阵L及上三角阵R，使

$$A=LR \tag{4.2}$$

故只要由A的元素计算出L、R的元素，解方程组(4．1)的问题，就非常容易解决了

(一) 紧 凑 格 式

设

$$L=\begin{pmatrix} 1 & & & & 0 \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3}\cdots & & 1 \end{pmatrix},\quad R=\begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ & r_{22} & \cdots & r_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ 0 & & & r_{nn} \end{pmatrix}$$

代入(4．2)，根据矩阵的运算法则，可得

$$\left.\begin{aligned} & a_{1j}=r_{1j},\ j=1,\ 2,\ \cdots,\ n,\ l_{ii}=1 \\ & a_{ij}=l_{i1}r_{1j}+l_{i2}r_{2j}+\cdots+l_{i,i-1}r_{i-1,j}+r_{ij}, \\ & \qquad\qquad\qquad\qquad 2\leqslant i\leqslant j\leqslant n \\ & a_{ij}=l_{i1}r_{1j}+l_{i2}r_{2j}+\cdots+l_{ij}r_{jj},\quad i>j\geqslant 2 \\ & a_{i1}=l_{i1}r_{11},\quad i=2,\ \cdots,\ n \end{aligned}\right\} \tag{4．3}$$

所以

$$\left.\begin{aligned} & r_{1j}=a_{1j},\ l_{i1}=a_{i1}/r_{11},\ j=1,2,\cdots,n,\ i=2,3,\cdots,n \\ & r_{ij}=a_{ij}-(l_{i1}r_{1j}+\cdots+l_{i,i-1}r_{i-1,j}),\ 2\leqslant i\leqslant j\leqslant n \\ & l_{ij}=\{a_{ij}-(l_{i1}r_{1j}+l_{i2}r_{2j}+\cdots+l_{i,j-1}r_{j-1,j})\}/r_{jj},\ i>j \end{aligned}\right\} \tag{4.4}$$

公式(4．4)就是由阵A的元素求L及R的元素的递推公式，它

不含中间运算结果 $a_{ij}^{(k)}$，所以称为紧凑格式（方案）。

以所求出的 $\boldsymbol{L}$ 及 $\boldsymbol{R}$ 的元素，解方程组（4.1）如下：

设 $\boldsymbol{y}=(y_1, y_2, \cdots, y_n)^T$

解 $\boldsymbol{L}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{b}$

则得

$$\left.\begin{aligned}&y_1=b_1\\&l_{i1}y_1+l_{i2}y_2+\cdots+l_{i,i-1}y_{i-1}+y_i=b_i\\&\qquad\qquad i=2, 3, \cdots, n\end{aligned}\right\}$$

从而有

$$\left.\begin{aligned}&y_1=b_1\\&y_i=b_i-\sum_{k=1}^{i-1}l_{ik}y_k, \quad i=2, 3, \cdots, n\end{aligned}\right\} \tag{4.5}$$

其次，将已算出的 $\boldsymbol{y}$ 代入 $\boldsymbol{R}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$ 中，解得

$$\left.\begin{aligned}&r_{nn}x_n=y_n\\&r_{ii}x_i+r_{i,i+1}x_{i+1}+\cdots+r_{in}x_n=y_i\\&\qquad i=n-1, n-2, \cdots, 2, 1\end{aligned}\right\}$$

从而有

$$\left.\begin{aligned}&x_n=y_n/r_{nn}\\&x_i=(y_i-\sum_{k=i+1}^{n}r_{ik}x_k)/r_{ii}, \quad i=n-1, n-2, \cdots, 1\end{aligned}\right\} \tag{4.6}$$

这就是回代过程，算出了（4.1）的解。

综上所述，只要系数阵 $\boldsymbol{A}$ 能分解成(4.2)，则用(4.4)、(4.5)、(4.6)即可算出(4.1)的解，这就是用紧凑格式解方程组。

（二）解对称系数阵方程组的改进平方根法

设（4.1）中的系数阵 $\boldsymbol{A}$ 的各阶主子式不等于零，则由前节的定理一知，存在单位下三角阵 $\boldsymbol{L}$，对角阵 $\boldsymbol{D}$ 及单位上三角

阵$\boldsymbol{U}$，使

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LDU}$$

若$\boldsymbol{A}$是对称的，即 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}^T$，则

$$\boldsymbol{LDU}=\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{D}\boldsymbol{L}^T$$

由分解的唯一性得

$$\boldsymbol{U}=\boldsymbol{L}^T,\ \boldsymbol{L}=\boldsymbol{U}^T$$

所以

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LDL}^T \tag{4.7}$$

从而得

定理 当n阶阵对称且各阶主子式不等于0时，则存在单位下三角阵$\boldsymbol{L}$及非奇异对角阵$\boldsymbol{D}$，使(4.7)成立．且此分解唯一．

今将(4.7)变形，记

$$\boldsymbol{D}=\begin{pmatrix} d_{11} & & & 0 \\ & d_{22} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & d_{nn} \end{pmatrix},\ \boldsymbol{L}^T=\begin{pmatrix} 1 & l_{12} & l_{13}\cdots & l_{1n} \\ & 1 & l_{23}\cdots & l_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ 0 & & & 1 \end{pmatrix}$$

令

$$\boldsymbol{R}=\boldsymbol{DL}^T=\begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ & r_{22} & \cdots & r_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ 0 & & & r_{nn} \end{pmatrix}$$

求$\boldsymbol{D}$及$\boldsymbol{L}$．由公式得

$$\left.\begin{array}{l} d_{ii}=r_{ii},\ i=1,\ 2,\ \cdots,\ n \\ l_{ij}=r_{ij}/r_{ii},\ 1\leqslant i\leqslant j\leqslant n \\ l_{ii}=1,\ l_{ij}=0(i>j),\ r_{ij}=0(i>j) \end{array}\right\}$$

从而

$$A = LR = \begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ \frac{r_{12}}{r_{11}} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ \frac{r_{1n}}{r_{11}} & \frac{r_{2n}}{r_{22}} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ & r_{22} & \cdots & r_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ 0 & & & r_{nn} \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

这是个 LR 分解，当然分解唯一，而且不难验证这个积$L \cdot R$是对称的。

现设

$$l_{ij} = r_{ij}/r_{ii}, \quad 1 \leqslant i \leqslant j \leqslant n$$

由(4．8)解得由A的元素计算L、R元素的计算公式：

$$\left.\begin{aligned} & r_{1j} = a_{1j}, \quad 1 \leqslant i \leqslant j \leqslant n \\ & r_{ij} = a_{ij} - \left\{\frac{r_{1i}}{r_{11}} r_{1j} + \frac{r_{2i}}{r_{22}} r_{2j} + \cdots + \frac{r_{i-1,i}}{r_{i-1,i-1}} r_{i-1,j}\right\} \\ & r_{ij} = 0 \ (i > j) \end{aligned}\right\} \quad (4.9)$$

矩阵L及R确定出后，为解方程组(4．1)，由 $Ly = b$ 解得

$$\left.\begin{aligned} & y_1 = b_1 \\ & y_i = b_i - \left(\frac{r_{1i}}{r_{11}} y_1 + \frac{r_{2i}}{r_{22}} y_2 + \cdots + \frac{r_{i-1,i}}{r_{i-1,i-1}} y_{i-1}\right) \\ & \qquad i = 2, \ \cdots, \ n \end{aligned}\right\} \quad (4.10)$$

再解 $Rx = y$ 得

$$\left.\begin{aligned} & x_n = y_n / r_{nn} \\ & x_i = \left(y_i - \sum_{k=i+1}^{n} r_{ik} x_k\right) / r_{ii} \\ & \qquad i = n-1, n-2, \cdots, 1 \end{aligned}\right\} \quad (4.11)$$

公式（4．9）、（4．10）、（4．11）就是解对称方程组的改进平方根法

之所以叫改进平方根法，是因为还有个平方根法解对称方程组，它在作矩阵的三角阵分解时，是要做开方运算的。而上

面用（4．9）～(4．11）提供的方法避免了开方运算，它是作为紧凑格式的特殊情况出现的。

改进平方根法，显然对对称正定系数阵的方程组是适用的。

例　用改进平方根法解下列方程组：

$$\begin{pmatrix} 5 & 10 & 30 \\ 10 & 30 & 100 \\ 30 & 100 & 354 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 20 \\ 70 \end{pmatrix}$$

解　所给方程组的系数阵的各阶主子式显然不等 0，故按公式（4．9）计算 r_{ij}：

$$r_{11}=5, \quad r_{12}=10, \quad r_{13}=30$$

$$r_{22}=a_{22}-\frac{r_{12}}{r_{11}}r_{12}=30-\frac{10}{5}\times 10=10$$

$$r_{23}=a_{23}-\frac{r_{12}}{r_{11}}r_{13}=100-\frac{10}{5}\times 30=40$$

$$r_{33}=a_{33}-\frac{r_{13}}{r_{11}}\times r_{13}-\frac{r_{23}}{r_{22}}\times r_{23}=354-\frac{30}{5}\times 30-\frac{40}{10}\times 40$$

$$=14$$

按公式（4．10）计算 y_i：

$$y_1=8$$

$$y_2=b_2-\frac{r_{12}}{r_{11}}y_1=20-\frac{10}{5}\times 8=4$$

$$y_3=b_3-\frac{r_{13}}{r_{11}}\times y_1-\frac{r_{23}}{r_{22}}\times y_2=70-\frac{30}{5}\times 8-\frac{40}{10}\times 4$$

$$=6$$

按公式（4．11）计算 x_i：

$$x_3=\frac{y_3}{r_{33}}=\frac{6}{14}=\frac{3}{7}$$

$$x_2=\frac{1}{r_{22}}(y_2-r_{23}\times x_3)=\frac{1}{10}\left(4-40\times\frac{3}{7}\right)=-\frac{46}{35}$$

$$x_1=\frac{1}{r_{11}}\ (y_1-r_{12}x_2-r_{13}x_3)$$

$$=\frac{1}{5}\left[8-10\left(-\frac{46}{35}\right)-30\times\frac{3}{7}\right]=\frac{58}{35}$$

故所求的解为：

$$x^*=\left(\frac{58}{35},\ -\frac{46}{35},\ \frac{3}{7}\right)^T$$

习　题　3．4

1　用紧凑格式分解如下矩阵为 LR 之积

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & 0 \\ 3 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

2　用改进平方根法解方程组

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

3　设阵 A 对称正定，且 $A=LL^T$（L 为下三角阵），试写出 L 及 A 的元素间的关系式．已知 L 后，如何计算 A^{-1} 呢？

§5　追　赶　法

在实际问题中经常遇到以三对角阵

$$A=\begin{pmatrix} d_1 & c_1 & & & 0 \\ a_2 & d_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & d_{n-1} & c_{n-1} \\ 0 & & & a_n & d_n \end{pmatrix} \tag{5.1}$$

为系数阵的线性方程组

$$Ax=b \tag{5.2}$$

对这种方程组的系数阵，用紧凑方案分解时很简单，求解也很简便。

引理 若 $a_i>0$，$c_i>0$，$d_i<0$，且

$$-d_1>c_1,\quad -d_n>a_n$$

$$-d_i\geqslant a_i+c_i,\quad i=2,\ 3,\ \cdots,\ n-1$$

则三对角阵 A 的各阶主子式都不等0。

证明 用数学归纳法，记阵 A 的 k 阶主子式为 Δ_k $(k=1,\ 2,\ \cdots,\ n)$，显然

$$\Delta_2=d_1d_2-a_2c_1\neq 0$$

假定所有满足条件的 $\Delta_{k-1}\neq 0$，在 Δ_k 中，第 $k-1$ 行减去第 k 行的 c_{k-1}/d_k 倍，则第 $k-1$ 行成为

$$\left(0,\ \cdots 0,\ a_{k-1},\ d_{k-1}-a_k\frac{c_{k-1}}{d_k},\ 0\right)$$

这时将 Δ_k 按第 k 列展开：

$$\Delta_k=d_k\begin{vmatrix} d_1 & c_1 & & & & 0 \\ a_2 & d_2 & c_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & a_{k-2} & d_{k-2} & c_{k-2} \\ 0 & & & & a_{k-1} & \overline{d}_{k-1} \end{vmatrix}=d_k\overline{\Delta}_{k-1}$$

其中 $\overline{d}_{k-1}=d_{k-1}-a_k\dfrac{c_{k-1}}{d_k}$，$\overline{\Delta}_{k-1}$ 为上式中 $k-1$阶行列式，

其第$k-1$行的对角元的绝对值$>a_{k-1}$。这是因为

$$|\overline{d}_{k-1}|=\left|d_{k-1}-a_k\frac{c_{k-1}}{d_k}\right|>|d_{k-1}|-$$

$$-\frac{a_k}{|d_k|}c_{k-1}>|d_{k-1}|-c_{k-1}>a_{k-1}$$

即 $\overline{\Delta_{k-1}}$ 满足假定条件，故 $\overline{\Delta_{k-1}}\neq 0$，从而 $\Delta_k\neq 0$。证完。

定理 满足（5.1）条件的三对角阵，有下列唯一三角分解式：

$$A=LR=\begin{pmatrix}1 & & & & 0\\ \alpha_2 & 1 & & & \\ & \alpha_3 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & \alpha_n & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\beta_1 & c_1 & & & 0\\ & \beta_2 & c_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \beta_{n-1} & c_{n-1}\\ 0 & & & & \beta_n\end{pmatrix} \tag{5.3}$$

其中

$$\left.\begin{aligned}&\beta_1=d_1\\ &\alpha_i=d_i/\beta_{i-1}\\ &\beta_i=d_i-\alpha_i c_{i-1},\quad i=,\ 2,\ 3,\cdots,\ n\end{aligned}\right\} \tag{5.4}$$

证明 由引理及前节的定理一知存在单位下三角阵 L 及上三角阵 R，使 $A=LR$，且唯一。将（5.3）右端作乘积，利用矩阵相等的定义，即得由 A 的元素计算 L 及 R 的元素的公式（5.4），这实际是计算 L 及 R 的紧凑方案。它与公式(4.4)一致。证完。

以下用(5.4)来解方程组(5.2)。显然(5.2)与下列方程组等价：

$$Rx=y \tag{5.5}$$

$$Ly=b \tag{5.6}$$

其中 $y=(y_1,\ y_2,\ \cdots,\ y_n)^T$ 为中间结果。

将(5.3)中的 L 代入（5.6），由于 $b=(b_1,\ b_2,\cdots,\ b_n)^T$

解得

$$\left.\begin{aligned}&y_1=b_1\\ &y_i=b_i-\alpha_i y_{i-1},\quad i=2,\cdots,\ n\end{aligned}\right\} \tag{5.7}$$

再将已算出的 R 及 y 代入（5.5），解得

$$\left.\begin{aligned}&x_n=y_n/\beta_n\\ &x_i=(y_i-c_i x_{i+1})/\beta_i,\ i=n-1,n-2,\cdots,1\end{aligned}\right\} \tag{5.8}$$

用(5.4)、(5.7)、(5.8)解三对角阵方程组(5.2)的方法，叫追赶法。它实际是用紧凑方案解三对角阵方程组。

例 设

$$A=\begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}, \qquad b=\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

用追赶法解方程组 $Ax=b$

解 由公式（5．4）算得

$$\beta_1=-2$$

$$\alpha_2=a_2/\beta_1=-\frac{1}{2}, \qquad \beta_2=d_2-\alpha_2 c_1=-2+\frac{1}{2}=-\frac{3}{2}$$

$$\alpha_3=a_3/\beta_2=-\frac{2}{3}, \qquad \beta_3=d_3-\alpha_3 c_2=-2+\frac{2}{3}=-\frac{4}{3}$$

$$\alpha_4=a_4/\beta_3=-\frac{3}{4}, \qquad \beta_4=d_4-\alpha_4 c_3=-2+\frac{3}{4}=-\frac{5}{4}$$

再由公式(5．7)，得

$$y_1=1$$

$$y_2=b_2-\alpha_2 y_1=1+\frac{1}{2}y_1=\frac{3}{2}$$

$$y_3=b_3-\alpha_3 y_2=0+\frac{2}{3}\times\frac{3}{2}=1$$

$$y_4=b_4-\alpha_4 y_3=-1-\left(-\frac{3}{4}\right)\times 1=-\frac{1}{4}$$

再由公式（5．8），即可算出方程组的解：

$$x_4=-\frac{1}{4}\Big/\left(-\frac{5}{4}\right)=\frac{1}{5}$$

$$x_3=(y_3-c_3 x_4)/\beta_3=-\frac{3}{5}$$

$$x_2=(y_2-c_2 x_3)/\beta_2=-\frac{7}{5}$$

$$x_1=(y_1-c_1 x_2)/\beta_1=-\frac{6}{5}$$

习 题 3.5

1 用追赶法解下列方程组

$$\begin{pmatrix} -4 & 1 & & 0 \\ 1 & -4 & 1 & \\ & 1 & -4 & 1 \\ 0 & & 1 & -4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

2 设A为三对角块阵

$$\begin{pmatrix} A_1 & C_1 & & & 0 \\ B_2 & A_2 & C_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & B_{k-1} & A_{k-1} & C_{k-1} \\ 0 & & & B_k & A_k \end{pmatrix}$$

其中A_i为方块阵，A的各阶主子式不等于零，求证A的L、R分解为

$$\begin{pmatrix} I & & & 0 \\ \Gamma_2 & I & & \\ & \Gamma_3 & I & \\ & & \ddots & \ddots \\ 0 & & \Gamma_k & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_1 & C_1 & & 0 \\ & D_2 & C_2 & \\ & & \ddots & \ddots \\ & & & C_{k-1} \\ 0 & & & D_k \end{pmatrix}$$

其中I为单位阵，D_i为方块阵，且非奇异，试写出A_i, B_i, C_i及Γ_i, D_i之间的关系式。

3* 设有方程组的系数阵为

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 & \gamma_1 & & & \beta_1 \\ \beta_2 & \alpha_2 & \gamma_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \beta_{n-1} & \alpha_{n-1} & \gamma_{n-1} \\ \gamma_n & & & \beta_n & \alpha_n \end{pmatrix}$$

试讨论给出解这种方程组的一种计算方案.

4 在引理中，当 $a_{i+1}=C_i$ $(i=1, 2,\cdots, n-1)$时，即三对角阵 A 为对称的，求证阵 A 是负定的.

§6 矩阵求逆

设 n 阶矩阵 A 非奇异，则解方程组

$$Ax=b$$

实际上可化为用不同的方式求逆矩阵 A^{-1}，因为方程组的精确解

$$x=A^{-1}b$$

所以在本节中将介绍几个有关求逆阵的重要概念和方法.

(一) 判别阵A是否可逆的方法

1 用消元法计算阵 A 的行列式 $|A|$

设 $a_{kk}^{(k)}\neq 0$ $(k=1, 2,\cdots, n)$，则存在单位下三角阵 L 和上三角阵 R，使

$$R=L^{-1}A$$

其中 R 的所有对角元 $r_{ii}\neq 0$，从而行列式

$$|A|=|R|\neq 0$$

即 A^{-1} 存在.

2 对角占优阵

定义1 当 n 阶阵 $A=[a_{ij}]$ 的各行（列）元素满足下列条件时，

$$|a_{ii}|\geqslant\sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{n}|a_{ij}|, \quad i=1, 2, \cdots, n \tag{6.1}$$

称阵 A 是对角占优的. 在(6.1)中若是严格不等号成立时，称阵 A 为强（严格）对角占优阵.

定理 1　强对角占优阵是可逆的。

证明　假设齐次线性方程组

$$Ax=0$$

有非 0 解 $x=(x_1, x_2, \cdots, x_n)^T$，$\max\limits_i|x_i|=1$。那末设 $|x_i|=1$，由

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j=0$$

得

$$|a_{ii}||x_i|\leqslant \sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n}|a_{ij}||x_j|$$

所以

$$|a_{ii}|\leqslant\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n}|a_{ij}|$$

这与题设矛盾，故齐次方程组只能有 O 解．从而 $|A|\neq0$．证完。

3　不可约对角占优阵

定义 2　若经过行或列交换，矩阵 A 能写成下列形式

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ 0 & A_{22} \end{pmatrix}$$

其中 A_{11}，A_{22} 为方块，则称阵 A 为可约的，否则称阵 A 为不可约的．

定理 2　当阵 A 不可约且对角占优，而 (6.1) 中至少有一个严格不等号成立（称阵 A 为不可约对角占优），则阵 A 是可逆的．

证明　不失一般性，设

$$|a_{11}|>\sum_{j=2}^{n}|a_{1j}| \tag{6.2}$$

$$|a_{ii}|=|\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n}|a_{ij}|,\quad i=2,3,\cdots,n \tag{6.3}$$

假定 $|A|=0$，即

$$Ax=0$$

有非零解$x=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T$，其中 $\max_i|x_i|=1$

以下证明

$$|x_1|=|x_2|=\cdots=|x_n|=1$$

为简便起见，设只有 $|x_p|=1$，对任意$r\neq p$，$|x_r|<1$，则必有 $a_{pr}=0$，$(r=1,2,\cdots n,p\neq r)$

事实上，若$a_{pr}\neq 0$，则由

$$Ax=0$$

的第 p 个方程得

$$\begin{aligned}|a_{pp}| &\leqslant |a_{p1}||x_1|+\cdots+|a_{pr}||x_r|+\cdots+|a_{pn}||x_n|\\ &\leqslant |a_{p1}|+\cdots+|a_{pr}||x_r|+\cdots+|a_{pn}|\\ &\leqslant |a_{p1}|+\cdots+|a_{pr}|+\cdots+|a_{pn}|\end{aligned}$$

这与假设（6.3）矛盾，故必有$a_{pr}=0$。

另一方面，若$a_{pr}=0$，则阵A的第 p 行中只有$a_{pp}\neq 0$，这与A的不可约性矛盾。

从而必有$x_r=1$，即不存在 r 满足 $|x_r|<1$，所以，齐次方程组必有非 0 解 $x=(1,1,\cdots,1)^T$，但此时，由 $Ax=0$ 的第一个方程得

$$|a_{11}|\leqslant\sum_{j=2}^{n}|a_{1j}||x_j|=\sum_{j=2}^{n}|a_{1j}|$$

这又与最初的假设（6．2）矛盾。从而可知 $Ax=0$ 没有非零解，即$|A|\neq 0$，阵A可逆。证完。

（二）用消元法求逆

设n阶阵A的逆A^{-1}存在，$AA^{-1}=A^{-1}A=I$。

为求A^{-1}的元素，设A^{-1}的列向量为 $u_1,u_2,\cdots,u_n$ 记

$$A^{-1}=(u_1,\ u_2,\ \cdots,u_n)$$

记单位阵 I 的列向量为 e_1，e_2，$\cdots$，e_n，即

$$I=(e_1,e_2,\cdots,e_n)$$

所以

$$A(u_1,u_2,\cdots,u_n)=(e_1,e_2,\cdots,e_n)$$

所以

$$Au_1=e_1,\quad Au_2=e_2,\quad \cdots,\quad Au_n=e_n \tag{6.4}$$

(6.4) 是具有同一系数阵A，而有不同左端以 u_i 为未知向量的n 个线性代数方程组。用消元法的紧凑格式求解是很方便的。求出 A^{-1} 的列向量u_1，u_2，…，u_n，A^{-1} 也就确定了。

设 $A=LR$ 为 LR 分解，代入(6.4)便得较实用的计算公式

$$Ru_i=L^{-1}e_i,\quad i=1,2,\cdots,n \tag{6.5}$$

例 1　用简单消元法求下列矩阵的逆

$$A=\begin{pmatrix}-1 & 8 & -2\\ -6 & 49 & -10\\ -4 & 34 & -5\end{pmatrix}$$

解　将所给矩阵A代入(6.4)。然后将它们用同一增广矩阵写出，记：

$$[A\,\vdots\,I]=\left(\begin{array}{ccc|ccc}-1 & 8 & -2 & 1 & 0 & 0\\ -6 & 49 & -10 & 0 & 1 & 0\\ -4 & 34 & -5 & 0 & 0 & 1\end{array}\right)$$

先对第1列进行消元，将-4，-6 化为0，得

$$\left(\begin{array}{ccc|ccc}-1 & 8 & -2 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 2 & -6 & 1 & 0\\ 0 & 2 & 3 & -4 & 0 & 1\end{array}\right)$$

再将第2列的2化为0，得

$$\left(\begin{array}{ccc|ccc}-1 & 8 & -2 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 2 & -6 & 1 & 0\\ 0 & 0 & -1 & 8 & -2 & 1\end{array}\right)$$

这实际就是(6.5)的增广阵表示，其中1，2，3列组成上三角阵 R，4、5、6列组成单位下三角阵 L^{-1}。经过回代过程，即解(6.5)得

$$A^{-1}=\begin{pmatrix} 95 & -28 & 18 \\ 10 & -3 & 2 \\ -8 & 2 & -1 \end{pmatrix}$$

(三) 加边求逆

加边求逆的基本思想是，从求低阶阵的逆开始，逐次加边扩大求逆，最后求出 n 阶阵的逆。

设 k 阶非奇异阵为

$$A_k=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \cdots a_{1k} \\ a_{21} & a_{22} \cdots a_{2k} \\ \vdots & \vdots \quad\quad \vdots \\ a_{k1} & a_{k2} \cdots a_{kk} \end{pmatrix}, \qquad k\geqslant 2$$

其对角元及各阶主子式不等于0，将 A_k 分块为

$$A_k=\begin{pmatrix} A_{k-1} & U_{k-1} \\ V_{k-1} & a_{kk} \end{pmatrix}$$

其中

$$A_{k-1}=\begin{pmatrix} a_{11} \cdots\cdots a_{1,k-1} \\ \vdots \quad\quad\quad \vdots \\ a_{k-1,1} \cdots a_{k-1,k-1} \end{pmatrix}$$

$$U_{k-1}=(a_{1k},a_{2k},\cdots,a_{k-1,k})^T$$

$$V_{k-1}=(a_{k1},a_{k2},\cdots,a_{k,k-1})$$

假定 A_{k-1}^{-1} 已求出，以下来求 A_k^{-1}。

设 A_k^{-1} 分块为

$$A=\begin{pmatrix} x_1 & x_2 \\ x_3 & x \end{pmatrix} \tag{6.6}$$

其中

$$x_1=\begin{pmatrix} x_{11} \cdots\cdots x_{1,k-1} \\ \vdots \quad\quad\quad \vdots \\ x_{k-1,1} \cdots x_{k-1,k-1} \end{pmatrix}$$

$$x_2=(x_{1k},\ x_{2k},\ \cdots,\ x_{k-1,k})^T$$

$$x_3=(x_{k1},\ x_{k2},\ \cdots,\ x_{k,k-1})$$

x 为常数

以下求 x_1，x_2，x_3 及 x，使得

$$A_k A_k^{-1}=A_k^{-1}A_k=I_k \quad (k\text{ 阶单位阵})$$

即

$$\begin{pmatrix} A_{k-1} & U_{k-1} \\ V_{k-1} & a_{kk} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 & x_2 \\ x_3 & x \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} I_{k-1} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

由此可得

$$A_{k-1}x_1+U_{k-1}x_3=I_{k-1} \tag{6. 7}$$

$$V_{k-1}x_1+a_{kk}x_3=0 \tag{6. 8}$$

$$A_{k-1}x_2+U_{k-1}x=0 \tag{6. 9}$$

$$V_{k-1}x_2+a_{kk}x=1 \tag{6.10}$$

先联立解(6. 9)与(6. 10)以求 x_2 及 x：

由于假设 A_{k-1}^{-1} 已知，故由(6. 9)得

$$x_2=-A_{k-1}^{-1}U_{k-1}x \tag{6.11}$$

将(6. 11)代入(6. 10)，得

$$-V_{k-1}A_{k-1}^{-1}U_{k-1}x+a_{kk}x=1$$

令

$$b_k=a_{kk}-V_{k-1}A_{k-1}^{-1}U_{k-1}$$

则求得 x：

$$x=\frac{1}{a_{kk}-V_{k-1}A_{k-1}^{-1}U_{k-1}}=\frac{1}{b_k} \tag{6.12}$$

将(6. 12)代入(6. 11)得

$$x_2=-A_{k-1}^{-1}U_{k-1}/b_k \tag{6.13}$$

其次联立解(6. 7)与(6. 8)，以求 x_1 及 x_3：

由于 A_{k-1}^{-1} 已知，故由(6. 7)得

$$\begin{aligned} x_1&=A_{k-1}^{-1}(I_{k-1}-U_{k-1}x_3) \\ &=A_{k-1}^{-1}-A_{k-1}^{-1}U_{k-1}x_3 \end{aligned} \tag{6.14}$$

将(6．14)代入(6．8)，得

$$V_{k-1}A_{k-1}^{-1}-V_{k-1}A_{k-1}^{-1}U_{k-1}x_3+a_{kk}x_3=0$$

所以 $(a_{kk}-V_{k-1}A_{k-1}^{-1}U_{k-1})x_3=-V_{k-1}A_{k-1}^{-1}$

所以 $b_kx_3=-V_{k-1}A_{k-1}^{-1}$

从而得

$$x_3=-V_{k-1}A_{k-1}^{-1}/b_k \tag{6.15}$$

将(6．15)代入(6．14)，得

$$x_1=A_{k-1}^{-1}+A_{k-1}^{-1}U_{k-1}V_{k-1}A_{k-1}^{-1}/b_k \tag{6.16}$$

将已求得(6．12)、(6．13)、(6．15)、(6．16)代入(6．6)中，便得所要求的

$$A_k^{-1}=\begin{pmatrix} A_{k-1}^{-1}+\dfrac{A_{k-1}^{-1}U_{k-1}V_{k-1}A_{k-1}^{-1}}{b_k} & -\dfrac{A_{k-1}^{-1}U_{k-1}}{b_k} \\ -\dfrac{V_k+A_{k-1}^{-1}}{b_k} & \dfrac{1}{b_k} \end{pmatrix} \tag{6.17}$$

其中 $A_1^{-1}=\dfrac{1}{a_{11}}$

$$b_k=a_{kk}-V_{k-1}A_{k-1}^{-1}U_{k-1},\ k=2,\ 3,\cdots,\ n$$

公式(6．17)表明，由于每个 A_k 是对 A_{k-1} 附加一行和一列得到的，所以上述求逆法，称为加边求逆法。

习　题　3．6

1　求证公式 $A^{-1}=(PA)^{-1}P$。其中 P 为 n 阶置换阵。

2　设 A 对称正定，且 $A=LL^T$，L 为下三角阵。

(1) 写出计算 A^{-1} 的公式。

(2) 证明 A 的行列式

$$|A|=(l_{11}\ l_{22}\cdots\ l_{nn})^2$$

其中 l_{ii} 为 L 的对角元。

§7 向量和矩阵的范数

在线性代数方程组的数值解法中，经常需要分析解向量的误差，需要比较误差向量的"大小"或"长度"．那么怎样定义向量的长度呢？我们在初等数学里知道，定义向量的长度，实际上就是对每一个向量按一定的法则规定一个非负实数与它对应，这一思想推广到 n 维线性空间里，就是所谓向量的范数或模。

（一）向量的范数

定义1 在实 n 维线性空间 R^n 上规定一个映射，它使任何向量 $x\in R^n$ 都对应一个非负实数，记为 $\|x\|$，如果满足下列条件：

1 非负：当 $x=0$ 时，$\|x\|=0$，当 $x\neq 0$ 时，$\|x\|>0$；

2 齐次：$\|kx\|=|k|\|x\|$，其中 k 为任意实数；

3 三角不等式：$\|x+y\|\leqslant\|x\|+\|y\|$，$x$，$y\in R^n$ 为任意的．

这时，就称它是 R^n 中定义了一个向量范数．

对R来讲，$\|x\|$ 就等于 x 的绝对值 $|x|$。

三个常用范数：

设 $x=(\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_n)^T$，则有

（Ⅰ）$\|x\|_1=|\xi_1|+|\xi_2|+\cdots+|\xi_n|$；

（Ⅱ）$\|x\|_2=\sqrt{x^Tx}=\sqrt{\xi_1^2+\xi_2^2+\cdots+\xi_n^2}$；

（Ⅲ）$\|x\|_\infty=\max\limits_i|\xi_i|$。

读者不难验证，上列三种常用范数满足定义条件。

在 R^n 上定义的任意向量范数尚有下列性质．

定理1 对任意 x，$y\in R^n$，下列不等式成立，

$$|\|x\|-\|y\||\leqslant\|x-y\| \tag{7.1}$$

证明 根据定义 1 的条件 3，

$$\|\boldsymbol{x}\| = \|(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})+\boldsymbol{y}\| \leqslant \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\| + \|\boldsymbol{y}\|$$

所以 $\|\boldsymbol{x}\| - \|\boldsymbol{y}\| \leqslant \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|$

另一方面还有

$$\|\boldsymbol{y}\| - \|\boldsymbol{x}\| \leqslant \|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}\| = \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|$$

所以必有

$$\big|\,\|\boldsymbol{x}\| - \|\boldsymbol{y}\|\,\big| \leqslant \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|$$ 证完。

定理 2 定义在 R^n 上的向量范数 $\|\boldsymbol{x}\|$ 是变量 $\boldsymbol{x}$ 分量的一致连续函数。

证明 设 $\boldsymbol{h}\in R^n$ 为任意向量，$\boldsymbol{e}_1$，$\boldsymbol{e}_2$，…，$\boldsymbol{e}_n$ 为 R^n 的一个基底，且

$$\boldsymbol{h} = h_1\boldsymbol{e}_1 + h_2\boldsymbol{e}_2 + \cdots + h_n\boldsymbol{e}_n$$

再假设

$$N = \sum_{j=1}^{n}\|\boldsymbol{e}_j\|$$

显然 N 为定常数，则当 $\max\limits_i|h_i|<\delta$ 时，由三角不等式得

$$\|\boldsymbol{h}\| = \sum_{i=1}^{n}|h_i|\,\|\boldsymbol{e}_i\| \leqslant N\max_i|h_i| < N\delta$$

对任意给定的正数 ε，当取 $\delta = \dfrac{\varepsilon}{N}$ 时，则必有

$$\big|\,\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{h}\| - \|\boldsymbol{x}\|\,\big| \leqslant \|\boldsymbol{h}\| < \varepsilon$$ 证完。

定理 3 在 R^n 上定义的任一向量范数 $\|\boldsymbol{x}\|$ 都与范数 $\|\boldsymbol{x}\|_1$ 等价，即存在正数 M 与 $m(M>m)$，对一切 $\boldsymbol{x}\in R^n$，不等式

$$m\|\boldsymbol{x}\|_1 \leqslant \|\boldsymbol{x}\| \leqslant M\|\boldsymbol{x}\|_1$$

成立。

证明 设 $\boldsymbol{x}\in R^n$，则 $\boldsymbol{x}$ 的连续函数 $\|\boldsymbol{x}\|$ 在有界闭集

$$G = \{\boldsymbol{x} \mid \|\boldsymbol{x}\|_1 = 1\}$$

上是有界的，且一定能达到其最大值及最小值．设其最大值为 M，最小值为 m，则有

$$m \leqslant \| x \| \leqslant M, \quad x \in R^n \tag{7.2}$$

考虑到 $\| x \|$ 在 G 上大于零，故 $m>0$。

设 $x \in R^n$ 为任意非零向量，则

$$\frac{x}{\| x \|_1} \in G$$

代入（7.2），得

$$m \leqslant \left\| \frac{x}{\| x \|_1} \right\| \leqslant M$$

所以

$$m \| x \|_1 \leqslant \| x \| \leqslant M \| x \|_1$$

证完。

由此定理不难推得：

推论　R^n 上定义的任何两个范数都是等价的。

对常用范数，容易验证下列不等式

$$\frac{1}{n} \| x \|_1 \leqslant \| x \|_\infty \leqslant \| x \|_1 \tag{7.3}$$

$$\| x \|_\infty \leqslant \| x \|_1 \leqslant n \| x \|_\infty \tag{7.4}$$

$$\| x \|_\infty \leqslant \| x \|_2 \leqslant \sqrt{n} \, \| x \|_\infty \tag{7.5}$$

有了范数的概念，我们就可以讨论向量序列的收敛性问题了。

定义 2　设给定 R^n 中的向量序列 $\{x_k\}$，即

$$x_0, \ x_1, \ \cdots, x_k, \ \cdots \tag{7.6}$$

其中

$$x_k = (x_1^{(k)}, \ x_2^{(k)}, \ \cdots, \ x_n^{(k)})^T$$

若对任何 i $(i=1, 2, \cdots, n)$，都有

$$\lim_{k \to \infty} x_i^{(k)} = x_i^*$$

则向量

$$x^* = (x_1^*, \ x_2^*, \ \cdots, \ x_n^*)^T$$

称为向量序列 $\{x_k\}$ 的极限，或者说向量序列 $\{x_k\}$ 依坐标收敛

于向量x^*。记为

$$\lim_{k\to\infty} x_k = x^*$$

定理 4 向量序列$\{x_k\}$依坐标收敛于x^*的充要条件是

$$\lim_{k\to\infty}\|x_k - x^*\| = 0 \tag{7.7}$$

此定理的证明作为练习留给读者。

如果一个向量序列$\{x_k\}$与向量x^*，满足(7.7)，就说向量序列$\{x_k\}$依坐标收敛于x^*。于是便得

向量序列依范数收敛与依坐标收敛是等价的。

(二) 矩阵的范数

定义 3 设A为n阶方阵，R^n中已定义了向量范数$\|\cdot\|$，则称$\sup\limits_{\|x\|=1}\|Ax\|$为阵$A$的范数或模。记为$\|A\|$：

$$\|A\| = \sup_{\|x\|=1}\|Ax\| \tag{7.8}$$

矩阵范数有下列基本性质：

1° 当$A=0$时，$\|A\|=0$，当$A\neq 0$时，$\|A\|>0$；

2° 对任意实数k和任意A，有

$$\|kA\| = |k|\,\|A\|$$

3° 对任意两个n阶阵A，B，有

$$\|A+B\| \leqslant \|A\| + \|B\|$$

4° 对任意向量$x\in R^n$和任意阵A，有

$$\|Ax\| \leqslant \|A\|\cdot\|x\| \tag{7.9}$$

5° 对任意两个n阶阵A，B，有

$$\|AB\| \leqslant \|A\|\|B\| \tag{7.10}$$

我们只证4°，5°。至于1°～3°读者可自行证之。

事实上，对4°，设$G=\{x\,|\,\|x\|=1\}$，当$x\in G$时，根据定义3，4°显然成立，当$x\in R^n$时，若$x=0$，则4°成为等式；若$x\neq 0$，则$\frac{x}{\|x\|}\in G$，故

$$\left\| A \cdot \frac{x}{\|x\|} \right\| \leqslant \|A\|$$

所以

$$\frac{1}{\|x\|}\|Ax\| \leqslant \|A\|$$

从而便得4°中的不等式.

对于5°，由定义 3 及4°易得

$$\|AB\| = \sup_{\|x\|=1}\|ABx\| \leqslant \sup_{\|x\|=1}\|A\| \cdot \|Bx\|$$

$$= \|A\| \sup_{\|x\|=1} \|Bx\| = \|A\| \cdot \|B\|$$

特别是，满足(7．9)的矩阵范数与向量范数，称为**相容的**或**协调的**。(7．9)称为**相容性条件**。

使用矩阵范数与向量范数时，必须满足相容性条件。

与常用向量范数相容的矩阵范数如下：

定理 5 设 n 阶方阵 $A=(a_{ij})$，则

Ⅰ 与 $\|x\|_1$ 相容的矩阵范数是

$$\|A\|_1 = \max_j \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}| \tag{7.11}$$

Ⅱ 与 $\|x\|_2$ 相容的矩阵范数是

$$\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_1} \tag{7.12}$$

其中 λ_1 为阵 A^TA 的最大特征值.

Ⅲ 与 $\|x\|_\infty$ 相容的矩阵范数是

$$\|A\|_\infty = \max_i \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| \tag{7.13}$$

证明 (7．11)，(7．13)，读者可用定义 3 自行证之。今只证公式 (7．12)．

由 $\|\cdot\|_2$ 的定义知，对任意$x \in R^n$，都有

$$\|Ax\|_2^2 = (Ax,\ Ax) = (A^TAx,\ x) \geqslant 0$$

故 A^TA 为对称半正定矩阵。设 A^TA 特征值为

$$\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n \geqslant 0$$

相应的特征向量为

$$e_1,\ e_2,\ \cdots,\ e_n$$

且 $(e_i,\ e_j)=\begin{cases}1, & i=j\\ 0, & i\neq j\end{cases}$ 对任意向量

设 $\quad x\in G=\{x \mid \|x\|_2=1\}$

$$x=x_1e_1+x_2e_2+\cdots+x_ne_n$$

则

$$A^TAx=\lambda_1x_1e_1+\lambda_2x_2e_2+\cdots+\lambda_nx_ne_n$$

从而

$$\|Ax\|_2^2=(A^TAx,\ x)=\sum_{i=1}^{n}\lambda_ix_i^2\leqslant\lambda_1\sum_{i=1}^{n}x_i^2=\lambda_1$$

所以

$$\|Ax\|_2\leqslant\sqrt{\lambda_1}$$

特别当 $x=e_1$ 时，上不等式等号成立，因而

$$\|A\|_2=\sup_{\|x\|=1}\|Ax\|_2=\sqrt{\lambda_1}\quad \text{证完。}$$

其次讨论阵A的范数$\|A\|$与A的特征值间的关系。

设 λ 为阵A的任一特征值，向量 e 为其相应的特征向量，则

$$\lambda e=Ae$$

因为

$$|\lambda|\|e\|=\|Ae\|\leqslant\|A\|\|e\|$$

所以

$$|\lambda|\leqslant\|A\| \tag{7.14}$$

从而得

引理 阵A的任一特征值的绝对值不超过A的范数 $\|A\|$。

定义 4 阵A的诸特征值的最大绝对值，称为阵A 的**谱半径**，记为

$$\rho(A)=\max_{1\leqslant i\leqslant n}|\lambda_i|$$

由引理可知

$$\rho(A)\leqslant\|A\| \qquad (7.15)$$

阵A的谱半径与A的某一范数还有下列关系：

定理6 对任给正数ε，必存在R^n中的某一范数$\|\cdot\|_p$，使

$$\|A\|_p\leqslant\rho(A)+\varepsilon \qquad (7.16)$$

证明 首先注意下列事实：设P为某n阶非奇异矩阵．则在R^n上定义向量范数 $\|x\|_p=\|Px\|_1$（可以验证$\|x\|_p$满足向量范数的定义），这时与$\|x\|_p$相容的矩阵A的范数

$$\|A\|_p=\|PAP^{-1}\|_1 \qquad (7.17)$$

这是因为

$$\|A\|_p=\sup_{\|x\|_p=1}\|Ax\|_p=\sup_{\|Px\|_1=1}\|P(Ax)\|_1$$

$$=\sup_{\|y\|_1=1}\|PAP^{-1}y\|_1=\|PAP^{-1}\|_1$$

其中 $y=Px$，则 $x=P^{-1}y$，以下来证公式(7.16)．

在线性代数中已知对任何n阶阵A，总存在非奇异阵S，使

$$SAS^{-1}=J=\Lambda+\bar{I} \qquad (7.18)$$

其中J为若唐阵．而

$$\Lambda=\begin{pmatrix}\Lambda_1 & & 0\\ & \ddots & \\ 0 & & \Lambda_m\end{pmatrix},\qquad \Lambda_i=\begin{pmatrix}\lambda_i & & 0\\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_i\end{pmatrix}$$

$$\bar{I}=\begin{pmatrix}\bar{I}_1 & & 0\\ & \ddots & \\ 0 & & \bar{I}_m\end{pmatrix},\qquad \bar{I}_i=\begin{pmatrix}0 & 1 & & 0\\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & 1\\ 0 & & & 0\end{pmatrix}$$

λ_i为A的特征值．作对角阵

$$D^{-1}=\begin{pmatrix}1 & & & 0\\ & \varepsilon & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \varepsilon^{n-1}\end{pmatrix}$$

对（7.18）作相似交换：

$$DSAS^{-1}D^{-1}=D\Lambda D^{-1}+D\bar{I}D^{-1}=\Lambda+\varepsilon\bar{I}$$

令 $P=DS$，则上式成为

$$PAP^{-1} = \Lambda + \varepsilon \overline{I}$$

所以

$$\|PAP^{-1}\|_1 \leqslant \|\Lambda\|_1 + \varepsilon \|\overline{I}\|_1 = \rho(A) + \varepsilon$$

由(7.17)知(7.16)成立。证完。

（三）线性方程组的性态

线性代数方程组

$$Ax = b \tag{7.19}$$

的系数阵 A 和右端向量 b，往往是观测来的，因此它们不可避免地带有误差。这种原始数据的误差，对方程组求解的影响如何，是必须探讨的。此即所谓方程组的条件问题。

（1）假设系数阵 A 是精确的，且非奇异，今讨论右端 b 的误差对方程组解的影响。

设 δb 为 b 的误差，而相应的解的误差是 δx，则有

$$A(x + \delta x) = b + \delta b$$

所以

$$\delta x = A^{-1}\delta b$$

$$\|\delta x\| \leqslant \|A^{-1}\| \|\delta b\|$$

但由（7.19）

$$\|b\| \leqslant \|A\| \|x\|$$

所以

$$\|\delta x\| \|b\| \leqslant \|A\| \|A^{-1}\| \|x\| \|\delta b\|$$

所以当 $b \neq 0$，$x \neq 0$ 时，有

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leqslant \|A\| \|A^{-1}\| \frac{\|\delta b\|}{\|b\|} \tag{7.20}$$

即解 x 的（相对）误差是初始数据 b 的（相对）误差的 $\|A\|\|A^{-1}\|$ 倍。

（2）假设右端 b 是精确的，系数阵 A 有误差，今讨论 A 的误差对解的影响。

设阵A的误差为δA，而相应的解的误差为δx，则有

$$(A+\delta A)(x+\delta x)=b$$

设A及$A+\delta A$非奇异（当$\|A^{-1}\delta A\|<1$时即可，读者自行证之），则

$$Ax+(\delta A)x+A\delta x+\delta A\delta x=b$$

$$A\delta x=-(\delta A)x-\delta A\delta x$$

$$\delta x=-A^{-1}(\delta A)x-A^{-1}\delta A\delta x$$

根据范数性质

$$\|\delta x\|\leqslant\|A^{-1}\|\|\delta A\|\|x\|+\|A^{-1}\|\|\delta A\|\|\delta x\|$$

$$(1-\|A^{-1}\|\|\delta A\|)\|\delta x\|\leqslant\|A^{-1}\|\|\delta A\|\|x\|$$

于是有

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|}\leqslant\frac{\|A^{-1}\|\|\delta A\|}{1-\|A^{-1}\|\|\delta A\|}=\frac{\|A^{-1}\|\|A\|\dfrac{\|\delta A\|}{\|A\|}}{1-\|A^{-1}\|\|A\|\dfrac{\|\delta A\|}{\|A\|}}\tag{7.21}$$

若$\|A^{-1}\|\|A\|\dfrac{\|\delta A\|}{\|A\|}$很小，则$\|A^{-1}\|\|A\|$表示相对误差的近似放大率。

由（7.20），（7.21）可知，b及A有微小改变时，数$\|A\|\|A^{-1}\|$可标志着方程组解x的敏感程度。解x的相对误差可能随$\|A\|\|A^{-1}\|$的增大而增大。所以系数阵A刻画了线性代数方程组的性态。

定义5 设A为n阶非奇异阵，称数$\|A\|\|A^{-1}\|$为阵A的**条件数**，记为$\mathrm{cond}(A)$。

条件数有下列性质，是很容易证明的：

i）$\mathrm{cond}(A)\geqslant1$；

ii）$\mathrm{cond}(kA)=\mathrm{cond}(A)$，$k$为非零常数；

iii）若$\|A\|=1$，则$\mathrm{cond}(A)=\|A^{-1}\|$。

当$\mathrm{cond}(A)$相对地大时，称方程组(7.19)为病态的，否则

称为良态的。

若方程组为病态的，则求解过程中的舍入误差对解会有严重的影响。

例如　对方程组

$$\begin{pmatrix} 1.001 & 0.25 \\ 0.25 & 0.0625 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.501 \\ 0.375 \end{pmatrix}$$

其解　$x^* = (1,2)^T$，但如果把系数及右端取成其近似数，比如：

$$\begin{pmatrix} 1 & 0.25 \\ 0.25 & 0.063 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.5 \\ 0.37 \end{pmatrix}$$

则其解变为$\overline{x} = (4, -10)^T$,系数及右端绝对误差最大变化为$\frac{1}{2}\times 10^{-2}$，而解变化却较大。$x_2$的值,后者为前者的5倍,以下看其条件数。

$$A = \begin{pmatrix} 1.001 & 0.25 \\ 0.25 & 0.0625 \end{pmatrix}, A^{-1} = \begin{pmatrix} 1000 & -4000 \\ -4000 & 16016 \end{pmatrix}$$

因为

$$\|A\|_\infty = 1.251,\quad \|A^{-1}\|_\infty = 20016$$

所以

$$\text{cond}(A) = 25040$$

表明所给方程组是病态的。在本书中我们不讨论病态方程组的解法。

习　　题　3·7

1　设$x = (1, -2, 3)^T$，$y = (0, 2, 3)^T$，计算x与y的三种常用范数。

2　如果$\lim\limits_{k\to\infty}\|x_k\| = \|a\|$，是否就有$\{x_k\}$收敛于向量$a$?

3　设$C_1 = \{x \mid \|x\|_\infty = 1,\ x \in R^3\}$，问$C_1$的几何意义是

什么？设 $C_2=\{x \mid \|x\|_1=1, \quad x\in R^2\}$，问 C_2 的几何意义是什么？

4　设

$$A=\begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ -1 & 2 & 3 \\ 0 & -2 & 1 \end{pmatrix}$$

计算 $\|A\|_\infty, \|A\|_1, \|A\|_2$。

5　若 $\lim\limits_{k\to\infty} A_k = A, \lim\limits_{k\to\infty} x_k = x^*$，则

$\lim\limits_{k\to\infty} A_k x_k = A x^*$。

6　设阵 A 与阵 B 是对称的。求证

$\rho(A+B)\leqslant\rho(A)+\rho(B)$

7　设有矩阵 A，且 $\|A\|<1$，证明 $I-A$ 非奇异，且有

$$\|(I-A)^{-1}\|\leqslant\frac{1}{1-\|A\|}$$

8　设阵 A 非奇异，求证

$$\|A^{-1}\|\geqslant\frac{1}{\|A\|}$$

9　证明

$$A=\begin{pmatrix} 1 & 0.4 & 0.7 \\ 0.1 & 1 & 0.2 \\ 0.3 & 0.2 & 1 \end{pmatrix}$$

非奇异，并求 $\|A^{-1}\|_1$ 的一个下界，（不求 A^{-1}）。

10　设

$$A=\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1.001 & 2.001 \end{pmatrix}$$

在范数 $\|\cdot\|_1$，$\|\cdot\|_\infty$ 的意义下分别求 cond(A)。

11　设 n 阶阵 A 非奇异，并在 R^n 中定义了范数 $\|\cdot\|$，则 $\|x\|_A=\|Ax\|$ 也是 R^n 中的一种范数，$x\in R^n$

12　设阵A可逆，δA 为误差，试证当 $\|A^{-1}\delta A\|<1$ 时，$A+\delta A$ 也可逆。

§8　简单迭代法

迭代法是解线性代数方程组的另一类重要方法。它的基本思想与第二章介绍的迭代法一样，即从任一初始向量 x_0 开始，按某一规则，不断进行修改，形成向量序列 $\{x_k\}$。当 x_k 收敛于x^*($k\to\infty$)时，使x^*是所给方程组的解。

在这里研究下面三个问题：

一　如何构造迭代程序；二　向量序列 $\{x_k\}$ 收敛条件；

三　$\|x^*-x_k\|$的误差估计。

（一）构造迭代程序

设所给方程组为

$$Ax=b \tag{8.1}$$

其中A 为 n 阶非奇异阵，b 为已知向量。为构造迭代程序，必须把（8．1）变形，变形方法很多，比如，将A分解为两个矩阵之差

$$A=M-N \tag{8.2}$$

其中M非奇异，于是（8．1）可写为

$$Mx=Nx+b$$

$$x=M^{-1}Nx+M^{-1}b \tag{8.3}$$

令　$B=M^{-1}N$，$f=M^{-1}b$，即得

$$x=Bx+f \tag{8.4}$$

任取 $x_0\in R^n$，代入(8．4)右端，算得结果记为 x_1，再以 x_1代入(8．4)的右端，算得结果记为 x_2，如此作下去，便得迭代程序

$$x_{k+1}=B\,x_k+f,\ k=0,\ 1,\ 2,\cdots \tag{8.5}$$

称为简单迭代法，称 B 为迭代矩阵，$\{x_k\}$ 为迭代序列，若将

(8. 5) 用分量的形式表示为

$$x_i^{(k+1)}=\sum_{j=1}^{n}b_{ij}x_j^{(k)}+f_i,\quad i=1,2,\cdots,n,\quad k=0,1,2,\cdots$$

若序列收敛

$$\boldsymbol{x}_k\to\boldsymbol{x}^*\quad(k\to\infty)$$

显然有

$$\boldsymbol{x}^*=\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^*+\boldsymbol{f}\tag{8. 6}$$

即 $\boldsymbol{x}^*$ 为所求方程组 (8. 1) 的解。

(二) 迭代法的收敛性

设 (8. 4) 有解存在。由 (8. 5) 减 (8. 6) 得

$$\boldsymbol{x}_{k+1}-\boldsymbol{x}^*=\boldsymbol{B}(\boldsymbol{x}_k-\boldsymbol{x}^*)\tag{8. 7}$$

这就是 $\boldsymbol{x}_{k+1}$ 与 $\boldsymbol{x}_k$ 的误差间的关系。由此得

$$\boldsymbol{x}_{k+1}-\boldsymbol{x}^*=\boldsymbol{B}^k(\boldsymbol{x}_0-\boldsymbol{x}^*)\tag{8. 8}$$

为证明 $\boldsymbol{x}_k$ 收敛于 $\boldsymbol{x}^*$，先证

引理 1　设 $\boldsymbol{y}\in\boldsymbol{R}^n$ 为任一非 $\boldsymbol{O}$ 向量，则 $\boldsymbol{B}^k\boldsymbol{y}\to\boldsymbol{O}(k\to\infty)$ 的充要条件是 $\boldsymbol{B}^k\to\boldsymbol{O}\ (k\to\infty)$，即 $\boldsymbol{B}^k$ 的每个元素收敛于0。

证明　充分性显然，必要性用反证法。

设 $\boldsymbol{B}^k=[\boldsymbol{B}_1^{(k)},\cdots,\boldsymbol{B}_n^{(k)}]$，$\boldsymbol{B}_i^{(k)}$ 为 $\boldsymbol{B}^k$ 的列向量。假定 $\boldsymbol{B}_1^{(k)}\nrightarrow\boldsymbol{O}$，取 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{e}_1=(1,0,\cdots,0)^T$，则

$$\boldsymbol{B}^k\boldsymbol{e}_1=\boldsymbol{B}_1^{(k)}\nrightarrow\boldsymbol{O}\quad(k\to\infty)$$

这与题设矛盾。证完。

引理 2　$\boldsymbol{B}^k\to\boldsymbol{O}(k\to\infty)$ 的充要条件是

$$\rho(\boldsymbol{B})<1$$

由于矩阵序列按元素收敛与按模收敛的一致性（这是容易证明的）。所以引理 2 又可叙述为：

$\|\boldsymbol{B}^k\|\to 0\ (k\to\infty)$ 的充要条件是 $\rho(\boldsymbol{B})<1$

证明　充分性：

因为 $\rho(\boldsymbol{B})<1$，所以存在正数 ε，使 $\rho(\boldsymbol{B})+\varepsilon<1$，由 §7定理 6 知，存在一种范数 $\|\cdot\|_P$ 使

$$\|B\|_p \leqslant \rho(B)+\varepsilon$$

但

$$\|B^k\|_p \leqslant \|B\|_p^k \leqslant (\rho(B)+\varepsilon)^k$$

所以当 $k\to\infty$ 时，$\|B^k\|p\to 0$，由于 R^n 中范数的等价性，故当 $k\to\infty$时，必有$\|B^k\|\to 0$。

必要性：因为

$$(\rho(B))^k=\rho(B^k)\leqslant\|B^k\|\to 0 \quad (k\to\infty)$$

所以

$\rho(B)<1$。证完。

由引理可得下列基本结论：

定理 1 对任意初始向量x_0，迭代程序(8.5)收敛于(8.4)的解x^*的充要条件为 $\rho(B)<1$，而且此时(8.4)有唯一解x^*。

证明 对（8．8）应用引理1，引理2．知当 $k\to\infty$ 时 $x_{k+1}-x^*\to 0$，的充要条件是 $\rho(B)<1$。

将（8。4）改写为

$$(I-B)x=f \tag{8.9}$$

显然 $\rho(B)<1$时，(8.9)的系数行列式$(I-B)\neq 0$。从而(8.4)有唯一解。证完。

定理 1 的理论价值是很大的，但不适用，因为 $\rho(B)$ 不易求。下面给出实用的充分条件及误差估计。

定理 2 当$\|B\|<1$时，迭代程序（8.5)收敛于(8.4)的解x^*，且

$$\|x_k-x^*\|\leqslant\frac{\|B\|}{1-\|B\|}\|x_{k-1}-x_k\| \tag{8.10}$$

$$\|x_k-x^*\|\leqslant\frac{\|B\|^k}{1-\|B\|}\|x_1-x_0\| \tag{8.11}$$

证明 因为 $\rho(B)\leqslant\|B\|<1$，所以(8.5)收敛．其次，由（8。7）

$$\|x_k-x^*\|\leqslant\|B\|\|x_{k-1}-x^*\|$$

$$\leqslant \|B\| \|x_{k-1} - x_k + x_k - x^*\|$$
$$\leqslant \|B\| \|x_{k-1} - x_k\| + \|B\| \|x_k - x^*\|$$

由上式可得

$$(1 - \|B\|)\|x_k - x^*\| \leqslant \|B\| \|x_{k-1} - x_k\|$$

从而便得（8.10）。

又从（8．5）知

$$x_k - x_{k-1} = B(x_{k-1} - x_{k-2}) = \cdots = B^{k-1}(x_1 - x_0)$$

所以

$$\|x_k - x_{k-1}\| \leqslant \|B\|^{k-1} \|x_1 - x_0\|$$

将此式代入(8．10)便得(8．11)．证完．

只要$\|B\|$不很接近于1，(8．11）可以作为误差估计式．当$\|x_k - x_{k-1}\|$很小时，还可用（8.10）判断迭代过程是否应终止．

由于$\|B\|_1 = \max\limits_j \sum\limits_{i=1}^{n} |b_{ij}|$，$\|B\|_\infty = \max\limits_i \sum\limits_{j=1}^{n} |b_{ij}|$，都能很方便地用矩阵$B$的元素来表示，用它来直接判断是否收敛，显然是很方便的．

（三）雅可比迭代法

在（8．1）中，假定矩阵A的对角元不等于0，记为

$$D = \text{diag}(a_{11}, a_{22}, \cdots, a_{nn})$$

分解A为

$$A = D - N$$

这时迭代程序（8．3）成为

$$x_{k+1} = D^{-1}Nx_k + D^{-1}b \qquad (8.3)_1$$

称为雅可比迭代，迭代矩阵$B = D^{-1}N$，显然对角元全部为0．对雅可比迭代收敛的充分条件，由下面定理给出．

定理3　当矩阵A为严格对角占优或不可约对角占优时，$\rho(B) = \rho(D^{-1}N) < 1$，雅可比迭代收敛．

证明 因为A严格对角占优，所以

$$\|B\|_\infty=\|D^{-1}N\|_\infty<1$$

由定理 2 知雅可比迭代收敛．

若A不可约对角占优，则 $I-B=D^{-1}A$ 也为不可约对角占优．设 $\rho(B)=|\lambda_1|$，因 λ_1 为B的特征值，所以

$$|\lambda_1 I-B|=0$$

从而有

$$\left|I-\frac{1}{\lambda_1}B\right|=0 \tag{8.12}$$

如果 $\rho(B)=\lambda_1\geqslant1$，因 $I-B$ 为不可约对角占优，由 § 6定理 2 知

$$\left|I-\frac{1}{\lambda_1}B\right|\neq0$$

与（8.12)矛盾．所以必有 $\rho(B)<1$． 证完．

例 用雅可比法解下列方程组（精确到10^{-3}）：

$$\begin{pmatrix}4&0.24&-0.08\\0.09&3&-0.15\\0.04&-0.08&4\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}8\\9\\20\end{pmatrix}$$

解 先将方程组变形，以 4、3、4 分别除三个方程两边，得

$$\begin{pmatrix}1&0.06&-0.02\\0.03&1&-0.05\\0.01&-0.02&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2\\3\\5\end{pmatrix}$$

从而

$$\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&-0.06&0.02\\-0.03&0&0.05\\-0.01&0.02&2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}2\\3\\5\end{pmatrix}$$

由于$\|B\|_\infty=0.08<1$，故对任意初始向量 x_0,迭代程序收敛．今取 $x_0=(2,3,5)^T$ 作迭代，

$$\begin{pmatrix} x_1^{(1)} \\ x_2^{(1)} \\ x_3^{(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -0.06 & 0.02 \\ -0.03 & 0 & 0.05 \\ -0.01 & 0.02 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 5 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.92 \\ 3.19 \\ 5.04 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x_1^{(2)} \\ x_2^{(2)} \\ x_3^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -0.06 & 0.02 \\ -0.03 & 0 & 0.05 \\ -0.01 & 0.02 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1.92 \\ 3.19 \\ 5.04 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.909 \\ 3.194 \\ 5.045 \end{pmatrix}$$

也可列表计算如下：

	x_1	x_2	x_3	f_i
	0	-0.06	0.02	2
	-0.03	0	0.05	3
	-0.01	0.02	0	5
$\mathbf{x}_0$	2	3	5	
$\mathbf{x}_1$	1.92	3.19	5.04	
$\mathbf{x}_2$	1.909	3.194	5.045	
$\mathbf{x}_3$	1.909	3.194	5.045	

因为在所要求的精度内 $x_3 = x_2$，故停止计算．x_3 即为所求近似解．

习　题　3．8

1　用简单迭代法解下列方程组

（1）$\begin{pmatrix} 7 & 1 & 2 \\ 2 & 8 & 2 \\ 2 & 2 & 9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10 \\ 8 \\ 6 \end{pmatrix}$

（2）$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.1 & 0.02 & -0.04 \\ -0.2 & 0.06 & 0.1 \\ 0.05 & 0.1 & 0.03 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$

2　设 $Ax=b$ 为对称正定方程组，求使迭代程序

$$x_{k+1}=x_k+\alpha(b-Ax_k)$$

收敛的数 α 的变化范围，然后用此法解方程组

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

3　试证，当 $\rho(B)<1$ 时，方程组(8．1)的解 x^*可表为向量无穷级数的形式

$$x^*=f+Bf+B^2f+\cdots+B^kf+B^{k+1}f+\cdots$$

§9　采德尔(Seidel)迭代法

采德尔迭代法也叫点高斯 (Gauss)—采德尔迭代法．简称为 $G—S$ 迭代法，其基本思想及迭代程序如下：

假设对任意初始向量 x_0，用(8．5)已算出 x_1 的第 1 个分量 $x_1^{(1)}$．如果迭代程序收敛的话，则新分量 $x_1^{(1)}$比 x_0 的第 1 个分量$x_1^{(0)}$更接近于x^*的第 1 个分量x_1^*．那么计算 $x_2^{(1)}$时，不用

$$x_0=(x_1^{(0)},\ x_2^{(0)},\ \cdots,\ x_n^{(0)})^T$$

而用

$$\overline{x}_0=(x_1^{(1)},\ x_2^{(0)},\ \cdots,\ x_n^{(0)})^T$$

即计算下一个分量时，要用刚算出的新分量，会不会更精确些呢？$G—S$ 法就是基于这种想法提出来的迭代法．其迭代程序用向量的分量表示为

$$x_i^{(k+1)}=\sum_{j=1}^{i-1}b_{ij}x_j^{(k+1)}+\sum_{j=i+1}^{n}b_{ij}x_j^{(k)}+f_i \quad (9.1)$$

$$i=1,2,\cdots,n;\quad k=0,1,2,\cdots$$

用矩阵表示为

$$x_{k+1}=Lx_{k+1}+Ux_k+f,\quad k=0,1,2,\cdots \quad (9.2)$$

其中

$$L+U=B \tag{9.3}$$

$$L=\begin{pmatrix} 0 & & & & 0 \\ b_{21} & 0 & & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ b_{n1} & b_{n2} & \cdots & b_{n,n-1} & 0 \end{pmatrix}, \quad U=\begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1n} \\ & b_{22} & \cdots & b_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ 0 & & & b_{nn} \end{pmatrix}$$

G—S 迭代法，由(9．2)知

$$(I-L)x_{k+1}=Ux_k+f$$

I为单位阵，I—L可逆．所以

$$x_{k+1}=(I-L)^{-1}Ux_k+(I-L)^{-1}f \tag{9.4}$$

其中矩阵 $(I-L)^{-1}U$，记为

$$G=(I-L)^{-1}U$$

称为 G—S 迭代矩阵．

由此可见，对(8.4) 用G—S 迭代法，就相当于将(9．2)变形为

$$x=(I-L)^{-1}Ux+(I-L)^{-1}f \tag{9.5}$$

再用简单迭代法．于是根据简单迭代法收敛性定理1，可得

定理1　对任意初始向量 x_0，G—S 程序收敛的充要条件是 $\rho(G)<1$．

但较为实用的充分条件是

定理2　若 $\|B\|_\infty<1$，则对任意初始向量 x_0，G—S 程序收敛．设

$$\beta_i=\sum_{j=1}^{i-1}|b_{ij}|, \quad r_i=\sum_{j=i}^{n}|b_{ij}|$$

$$\mu=\max_i\frac{r_i}{1-\beta_i}$$

则 $\mu\leqslant\|B\|_\infty$，而且有

$$\|x_{k+1}-x^*\|_\infty \leqslant \frac{\mu}{1-\mu}\|x_k-x_{k-1}\| \tag{9.6}$$

证明 先证 $\mu \leqslant \|B\|_\infty$ 因为

$$\beta_i + r_i \leqslant \|B\|_\infty$$

所以

$$r_i \leqslant \|B\|_\infty - \beta_i < 1 - \beta_i$$

则

$$\frac{r_i}{1-\beta_i} \leqslant \frac{\|B\|_\infty - \beta_i}{1-\beta_i} < 1$$

但

$$\frac{\|B\|_\infty - \beta_i}{1-\beta_i} \leqslant \|B\|_\infty$$

所以

$$\frac{r_i}{1-\beta_i} \leqslant \|B\|_\infty < 1$$

于是有

$$\mu = \max_i \frac{r_i}{1-\beta_i} \leqslant \|B\|_\infty < 1$$

其次，证 $\rho(G) \leqslant \mu < 1$

设 $\rho(G) = |\lambda_1|$，对应于 λ_1 的特征向量为

$$y = (y_1, \ y_2, \cdots, \ y_n)^T$$

$$\|y\|_\infty = \max_i |y_i| = 1, \quad i = 1, 2, \cdots, \ n$$

则

$$Gy = \lambda_1 y$$

$$(I-L)^{-1}Uy = \lambda_1 y$$

所以

$$Uy = \lambda_1 (I-L) y$$

即

$$(\lambda_1 L + U) y = \lambda_1 y$$

设 $|y_i| = 1$，则将其第 i 个方程按分量展开为

$$\lambda_1 y_i = \lambda_i \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} y_j + \sum_{j=i}^{n} b_{ij} y_j$$

所以 $\quad |\lambda_1| \leqslant |\lambda_1| \beta_i + r_i$

则有

$$|\lambda_1| = \frac{r_i}{1-\beta_i} \leqslant \mu < 1$$

即 $\rho(G) < 1$。从而由定理 1 知 $G-S$ 迭代法收敛。

为导出(9．6)，将(9．2)以矩阵的分量写出来，即

$$x_i^{(k+1)} = \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} x_j^{(k+1)} + \sum_{j=i}^{n} b_{ij} x_j^{(k)} + f_i$$

$$i = 1,\ 2,\ \cdots,\ n$$

所以

$$x_i^{(k+1)} - x_i^* = \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} (x_j^{(k+1)} - x_j^*) + \sum_{j=i}^{n} b_{ij} (x_j^{(k)} - x_j^*)$$

假设

$$\|x_{k+1} - x^*\|_\infty = \max_i |x_i^{(k+1)} - x_i^*| = |x_{i_0}^{(k+1)} - x_{i_0}^*|$$

则

$$\|x_{k+1} - x^*\|_\infty \leqslant \beta_{i_0} \|x_{k+1} - x^*\|_\infty + r_{i_0} \|x_k - x^*\|_\infty$$

所以

$$\|x_{k+1} - x^*\|_\infty \leqslant \frac{r_{i_0}}{1-\beta_{i_0}} \|x_k - x^*\|_\infty$$

$$\leqslant \mu \|x_k - x^*\|_\infty$$

$$\leqslant \mu (\|x_k - x_{k+1}\|_\infty + \|x_{k+1} - x^*\|_\infty)$$

于是有

$$\|x_{k+1} - x^*\|_\infty \leqslant \frac{\mu}{1-\mu} \|x_{k+1} - x_k\|_\infty$$ 证完。

读者可以证明下列充分条件：

定理 3 当 $\|B\|_1 < 1$ 时，$G-S$ 迭代法对任何初始向量 x_0 都收敛。

定理 4 若 A 为对称正定矩阵，则对任意初始向量 x_0，$G-S$ 迭代程序(9．2)收敛方程组(8．1)的解。

证明 设 λ 为迭代矩阵 $G=(I-L)^{-1}U$ 的特征值，y 为其对应的特征向量。设它们为复的。则

$$(I-L)^{-1}Uy=\lambda y$$

即

$$Uy=\lambda(I-L)y$$

以 Dy（D 为 A 的对角阵）与上式作内积，则

$$(Uy, Dy)=\lambda(y, Dy)-\lambda(Ly, Dy)$$

所以

$$(DUy, y)=\lambda(Dy, y)-\lambda(DLy, y) \tag{9.7}$$

由

$$A=D-DL-DU$$

且 $A=A^T$，故 $(DL)^T=DU$。

设

$$(DLy, y)=c+di \quad (c,\ d\text{为实数}) \tag{9.8}$$

则

$$\begin{aligned}(DUy, y)&=((DL)^T y, y)=(y, DLy)\\&=(\overline{DLy, y})=c-di\end{aligned} \tag{9.9}$$

设 $$(Dy, y)=a>0 \tag{9.10}$$

将(9.8),(9.9),(9.10)代入(9.7)中，得

$$c-di=\lambda(a-c-di)$$

于是有

$$|c-di|^2=|\lambda|^2|a-c-di|^2$$

所以

$$|\lambda|^2=\frac{c^2+d^2}{(a-c)^2+d^2} \tag{9.11}$$

又因为

$$\begin{aligned}(a-c)^2-c^2&=a(a-2c)\\&=a[(Dy, y)-(DLy, y)-(DUy, y)]\\&=a(Ay, y)>0\end{aligned}$$

则有

$$(a-c)^2>c^2$$

由(9.11)可知

$$|\lambda|^2<1$$

由于λ为G的任意特征值，故必有$\rho(G)<1$。从而 $G-S$ 迭代程序(9.2)收敛于方程组(8.1)的解。 证完。

最后指出，当$\|B\|_\infty<1$时，对方程组(8.4)使用简单迭代法或 $G-S$ 迭代法都收敛。而后者可能比前者快些。由于二者的迭代矩阵不一样，所以有时可能前者收敛，后者不收敛，或反之。

例 用 $G-S$ 迭代法解方程组

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -0.10 & -0.10 \\ -0.20 & 0 & -0.10 \\ -0.20 & -0.20 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1.2 \\ 1.3 \\ 1.4 \end{pmatrix}$$

(精确到10^{-4})。

解 $\|B\|_\infty=0.4<1$，故G—S迭代收敛。取$x_0=(0,0,0)^T$，计算结果如下表：

	x_1	x_2	x_3	f_i
	0	-0.10	-0.10	1.2
	-0.20	0	-0.10	1.3
	-0.20	-0.20	0	1.4
x_0	0	0	0	
x_1	1.2	1.06	0.948	
x_2	0.9992	1.0054	0.9991	
x_3	0.9996	1.0001	1.0001	
x_4	1.0000	1.0000	1.0000	
x_5	1.0000	1.0000	1.0000	

所以x_5即所求解．若用简单迭代法，从同一个x_0出发，则

$$x_\infty=(0.9964,\ 0.9990,\ 0.9984)^T$$

习 题 3.9

1 用 G—S 法解下列方程组

(1) $$\begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & 0 \\ -1 & 2 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

(2) $$\begin{pmatrix} 7 & 1 & 2 \\ 1 & 8 & 2 \\ 2 & 2 & 9 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 10 \\ 8 \\ 6 \end{pmatrix}.$$

2 讨论对于以下列矩阵为系数的方程组(8．4)，使用简单迭代法，G—S 法收敛域之间的相互关系．

$$A_1=\begin{pmatrix} 1 & 2 & -2 \\ 1 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 1 \end{pmatrix},\quad A_2=\begin{pmatrix} 2 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

§10 共轭斜量法

前几节的讨论我们是寻求收敛的序列$\{x_k\}$使$x_k\to x^*$ $(k\to\infty)$．本节我们将讨论使误差向量逐渐减少的想法构造一种通过有限次迭代求A为n阶对称正定阵线性方程组

$$Ax=b \tag{10.1}$$

的精确解的方法．

为此引进二次函数

$$f(x)=(Ax,x)-2(b,x) \tag{10.2}$$

不难证明，若x^*使(10．2)取极小值，则x^*为(10．1)的解．

事实上，因为

$$f(\boldsymbol{x}^*) = \min f(\boldsymbol{x}), \quad \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{R}^n$$

所以对任一向量 $\boldsymbol{S} \neq 0$，当 $\alpha \neq 0$ 时，有

$$f(\boldsymbol{x}^* + \alpha\boldsymbol{S}) - f(\boldsymbol{x}^*) > 0$$

因为

$$\begin{aligned}
& f(\boldsymbol{x}^* + \alpha\boldsymbol{S}) - f(\boldsymbol{x}^*) \\
&= (\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}^* + \alpha\boldsymbol{S}), \ \boldsymbol{x}^* + \alpha\boldsymbol{S}) - 2(\boldsymbol{b}, \boldsymbol{x}^* + \alpha\boldsymbol{S}) - f(\boldsymbol{x}^*) \\
&= \alpha(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{S}) + \alpha(\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}, \boldsymbol{x}^*) + \alpha^2(\boldsymbol{S}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{S}) - 2\alpha(\boldsymbol{b}, \boldsymbol{S}) \\
&= 2\alpha(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{S}) + \alpha^2(\boldsymbol{S}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{S}) - 2\alpha(\boldsymbol{b}, \boldsymbol{S})
\end{aligned}$$

当

$$\begin{aligned}
\left.\frac{df(\boldsymbol{x}^* + \alpha\boldsymbol{S})}{d\alpha}\right|_{\alpha=0} &= 2(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^*, \ \boldsymbol{S}) - 2(\boldsymbol{b}, \ \boldsymbol{S}) \\
&= 2(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{b}, \boldsymbol{S}) = 0 \qquad (10.3)
\end{aligned}$$

由于 $\boldsymbol{S} \neq 0$，故有

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{b}$$

反之，若

$$\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$$

由于

$$\begin{aligned}
f(\boldsymbol{x}^*) &= (\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{x}^*) - 2(\boldsymbol{b}, \boldsymbol{x}^*) \\
&= -(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{x}^*) \qquad (10.4)
\end{aligned}$$

对于任意非零向量 $\boldsymbol{x} \in R^n$，根据(10．2)，(10．4)有

$$\begin{aligned}
f(\boldsymbol{x}) - f(\boldsymbol{x}^*) &= (\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}, \ \boldsymbol{x}) - 2(\boldsymbol{b}, \ \boldsymbol{x}) + (\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{x}^*) \\
&= (\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*), (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*)) > 0 \ (\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{x}^*)
\end{aligned}$$

所以 $f(\boldsymbol{x}) > f(\boldsymbol{x}^*)$。这样求（10．1）的解的问题，就可转化为求（10．2)的极小值问题了．记

$$\begin{aligned}
\operatorname{grad} f(\boldsymbol{x}) &= \left(\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1}, \ \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2}, \ \cdots, \ \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_n}\right)^T \\
&= 2(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}) = -2\boldsymbol{r} \qquad (10.5)
\end{aligned}$$

其中 $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$，称为 $f(\boldsymbol{x})$ 在 $\boldsymbol{x}$ 点的梯度。

下面我们来建立求函数 $f(x)$ 的极小点的计算方法：

设任给初始向量 x_0，且已有近似向量 x_k。我们要求形如

$$x = x_k + \alpha_k S_k$$

沿着某一确定方向 S_k，求步长 α_k，使 $f(x)$ 达到极小。这里面有两个问题，一是方向 S_k 如何确定；二是步长 α_k 如何选取。人们自然会想到，在 n 维空间定义的函数 $y=f(x)$ 在 $x=x_k$ 处变化率为最大的方向是梯度方向，于是取其负梯度方向似乎是最好的。由于 $\mathrm{grad} f(x) = -2r$，故取残向量的方向为修改方向，于是有

$$S_k = r_k = b - Ax_k$$

然后求 x 在 r_k 方向上使 $f(x)$ 达到最小值，就是说求 $f(x_k+\alpha_k r_k)$ 的最小值。由

$$\frac{df(x_k+\alpha_k r_k)}{d\alpha_k} = 2[(Ax_k - b, r_k) + \alpha_k(r_k, Ar_k)] = 0$$

$$= 2[(-r_k, r_k) + \alpha_k(r_k, Ar_k)] = 0$$

得

$$\alpha_k = \frac{(r_k, r_k)}{(r_k, Ar_k)} \tag{10.6}$$

令

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k r_k, \quad k=0,1,2,\cdots \qquad (10.6)_1$$

等等继续做下去，由于

$$f(x_{k+1}) - f(x_k) = f(x_k+\alpha_k r_k) - f(x_k)$$

$$= \alpha_k^2(r_k, Ar_k) - 2\alpha_k(r_k, r_k)$$

$$= \alpha_k^2(r_k, Ar_k) - 2\alpha_k\frac{(r_k, r_k)}{(r_k, r_k)}(r_k, Ar_k)$$

$$= -\alpha_k^2(r_k, Ar_k) < 0$$

即

$$f(x_{k+1}) < f(x_k)$$

所以只要 $r_k \neq 0$，就会有

$$f(x_k) = \min f(x) \qquad (k\to\infty)$$

其中

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{r}_k,\boldsymbol{r}_{k+1}) &= (\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{b}-A(\boldsymbol{x}_k+\alpha_k\boldsymbol{r}_k)) \\ &= (\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k-\alpha_k A\boldsymbol{r}_k) \\ &= (\boldsymbol{r}_k,\boldsymbol{r}_k)-\alpha_k(\boldsymbol{r}_k, A\boldsymbol{r}_k)=0\end{aligned}$$

其几何解释如图 3．1.

不难发现$\boldsymbol{r}_k$是$f(\boldsymbol{x}_k)$的切线，是$f(\boldsymbol{x}_{k+1})$的内法线。

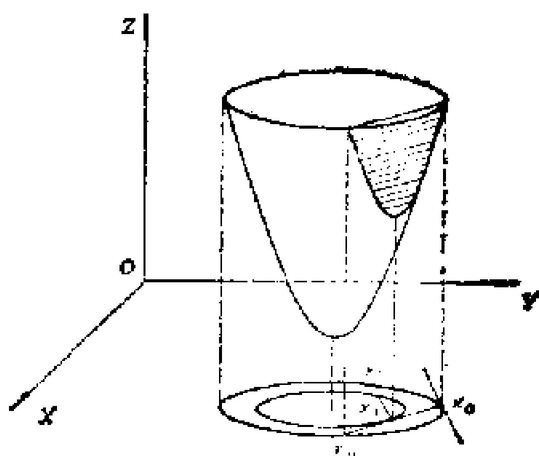


图 3．1

最速下降法迭代程序简单，存储量少，但实际计算时收敛很慢，特别在解附近更为显著，为此不宜单独使用。

下面我们介绍不单纯按$\boldsymbol{r}_k$方向做为修改方向，而是利用$\boldsymbol{r}_k$使其转动，构造一个A共轭向量$\boldsymbol{S}_k$做为修改方向，这样经过有限步运算就可得到精确解 x^*。这种求解的方法称为共轭斜量法

定义 设A是实对称正定矩阵，如果非零向量$\boldsymbol{x}$，$\boldsymbol{y}\in \boldsymbol{R}^n$，满足 $(A\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=0$，就称$\boldsymbol{x}$与$\boldsymbol{y}$关于矩阵$A$是共轭的或$\boldsymbol{x}$与$\boldsymbol{y}$是$A$正交的。

共轭斜量法的具体计算程序是：

任取初始向量$\boldsymbol{x}_0$，逐次构造近似解

$$\boldsymbol{x}_1,\ \boldsymbol{x}_2,\ \cdots,\boldsymbol{x}_{k-1}$$

同时逐次将其相应的残向量

$$\boldsymbol{r}_0,\ \boldsymbol{r}_1,\ \cdots,\ \boldsymbol{r}_{k-1}$$

$(\boldsymbol{r}_i=\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}_i)$正交化

$$(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r}_j)=0 \qquad (i\neq j)$$

然后再把它逐次A正交化为

$$\boldsymbol{S}_0(=\boldsymbol{r}_0),\ \boldsymbol{S}_1,\ \cdots,\ \boldsymbol{S}_{k-1}$$

其中$(AS_i, S_j)=0$, $(i\neq j)$. 而使（10．1）的近似解表示为

$$\boldsymbol{x}_k=\boldsymbol{x}_0+\alpha_0\boldsymbol{S}_0+\cdots+\alpha_{k-1}\boldsymbol{S}_{k-1}$$
$$=\boldsymbol{x}_{k-1}+\alpha_{k-1}\boldsymbol{S}_{k-1}$$

计算的具体步骤如下：

首先，任取 $\boldsymbol{x}_0$，设

$$\boldsymbol{r}_0=\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}_0,\quad \boldsymbol{S}_0=\boldsymbol{r}_0$$

令

$$\boldsymbol{x}_1=\boldsymbol{x}_0+\alpha_0\boldsymbol{S}_0$$

对应于 $\boldsymbol{x}_1$ 的残量为

$$\boldsymbol{r}_1=\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}_1$$

求 α_0，使

$$(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_1)=0$$

因为

$$\boldsymbol{r}_1=\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}_1=\boldsymbol{b}-A(\boldsymbol{x}_0+\alpha_0\boldsymbol{S}_0)=$$
$$=\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}_0-\alpha_0A\boldsymbol{S}_0=\boldsymbol{r}_0-\alpha_0A\boldsymbol{S}_0 \qquad (10.7)$$

令

$$(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_0)=(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_0)-\alpha_0(A\boldsymbol{S}_0, \boldsymbol{r}_0)=0$$

则

$$\alpha_0=\frac{(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_0)}{(A\boldsymbol{S}_0, \boldsymbol{r}_0)}=\frac{(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_0)}{(A\boldsymbol{S}_0, \boldsymbol{S}_0)} \qquad (10.8)$$

为求 $\boldsymbol{x}_2$，将 $\boldsymbol{r}_0$，$\boldsymbol{r}_1$ A正交化，设

$$\boldsymbol{S}_1=\boldsymbol{r}_1+\beta_0\boldsymbol{S}_0$$

求 β_0，使

$$(\boldsymbol{S}_1, A\boldsymbol{S}_0)=0$$

因为

$$(\boldsymbol{S}_1, A\boldsymbol{S}_0)=(\boldsymbol{r}_1+\beta_0\boldsymbol{S}_0, A\boldsymbol{S}_0)$$
$$=(\boldsymbol{r}_1, A\boldsymbol{S}_0)+\beta_0(\boldsymbol{S}_0, A\boldsymbol{S}_0)=0$$

所以

$$\beta_0=-\frac{(\boldsymbol{r}_1, A\boldsymbol{S}_0)}{(\boldsymbol{S}_0, A\boldsymbol{S}_0)} \qquad (10.9)$$

现将（10.9）变形，由（10.7）知

$$A S_0 = -\frac{1}{\alpha_0}(r_1 - r_0) \tag{10.10}$$

则有

$$(r_1, AS_0) = -(r_1, \frac{1}{\alpha_0}(r_1 - r_0))$$

$$= -\frac{1}{\alpha_0}(r_1, r_1)$$

$$= -\frac{(r_1, r_1)}{(r_0, r_0)}(AS_0, S_0)$$

所以

$$\beta_0 = \frac{(r_1, r_1)}{(r_0, r_0)} \tag{10.11}$$

至此已算出 x_1，并将 r_0，r_1 已A正交化为 S_0，S_1。

其次，令

$$x_2 = x_1 + \alpha_1 S_1$$

对应于 x_2 的残量为

$$r_2 = r_1 - \alpha_1 AS_1 \tag{10.12}$$

求 α_1，使

$$(r_2, r_1) = 0$$

则得

$$(r_2, r_1) = (r_1, r_1) - \alpha_1(AS_1, r_1) = 0$$

所以

$$\alpha_1 = \frac{(r_1, r_1)}{(AS_1, r_1)}$$

但

$$(AS_1, r_1) = (AS_1, S_1 - \beta_0 r_0)$$

$$= (AS_1, S_1) - \beta_0(AS_1, S_0)$$

$$= (AS_1, S_1)$$

所以

$$\alpha_1 = \frac{(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_1)}{(\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}_1, \boldsymbol{S}_1)} \tag{10.13}$$

又因为

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_0) &= (\boldsymbol{r}_1 - \alpha_1 \boldsymbol{A}\boldsymbol{S}_1, \boldsymbol{r}_0)\\ &= (\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_0) - \alpha_1(\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}_1, \boldsymbol{r}_0)\\ &= -\alpha_0(\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}_1, \boldsymbol{S}_0) = 0\end{aligned}$$

所以 $\boldsymbol{r}_0$，$\boldsymbol{r}_1$，$\boldsymbol{r}_2$ 正交。

为计算 x_3，将 $\boldsymbol{r}_0$，$\boldsymbol{r}_1$，$\boldsymbol{r}_2$ A正交化，令

$$\boldsymbol{S}_2 = \boldsymbol{r}_2 + \beta_1 \boldsymbol{S}_1$$

求 β_1，使

$$(\boldsymbol{S}_2, \boldsymbol{A}\boldsymbol{S}_1) = 0$$

得

$$\beta_1 = -\frac{(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{A}\boldsymbol{S}_1)}{(\boldsymbol{S}_1, \boldsymbol{A}\boldsymbol{S}_1)} \tag{10.14}$$

为将（10.14）变形，由（10.12）知

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}_1 = -\frac{1}{\alpha_1}(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1) \tag{10.15}$$

所以

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{A}\boldsymbol{S}_1) &= -(\boldsymbol{r}_2, \frac{1}{\alpha_1}(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1))\\ &= -\frac{1}{\alpha_1}(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_2)\\ &= -\frac{(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_2)}{(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_1)}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}_1, \boldsymbol{S}_1)\end{aligned}$$

所以

$$\beta_1 = \frac{(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_2)}{(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_1)} \tag{10.16}$$

又因为

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{S}_2, \boldsymbol{A}\boldsymbol{S}_0) &= (\boldsymbol{r}_2 + \beta_1 \boldsymbol{S}_1, \boldsymbol{A}\boldsymbol{S}_0)\\ &= (\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{A}\boldsymbol{S}_0) + \beta_1(\boldsymbol{S}_1, \boldsymbol{A}\boldsymbol{S}_0)\\ &= (\boldsymbol{r}_2, -\frac{1}{\alpha_0}(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_0)) = 0\end{aligned}$$

从而 r_0，r_1，r_2 已 A 正交化为 S_0，S_1，S_2。这样计算下去，就得共轭斜量法的计算公式如下：

$$\left.\begin{array}{l} x_0 \text{为任意初始向量} \\ r_0 = b - Ax_0 \\ x_{k+1} = x_k + \alpha_k S_k \\ r_{k+1} = r_k - \alpha_k AS_k \\ \alpha_k = \dfrac{(r_k, r_k)}{(AS_k, S_k)} \\ S_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k S_k \\ \beta_k = \dfrac{(r_{k+1}, r_{k+1})}{(r_k, r_k)} \\ k = 0, 1, 2, \cdots, n-1 \end{array}\right\} \qquad (10.17)$$

公式（10．17） 定义的向量有下列基本性质。

定理 1 若不含 O 向量的向量组

$$S_0, S_1, \cdots, S_k$$

是 A 共轭的，即

$$(AS_i, S_j) = 0 \quad (i \neq j)$$

则它们是线性无关的。

证明 如果 S_0，S_1，…，S_k 线性相关，则必存在不全为 0 的数 C_0，C_1，…，C_k，使

$$C_0S_0 + C_1S_1 + \cdots + C_kS_k = 0 \qquad (10.18)$$

假定 $C_i \neq 0$，$(0 \leqslant i \leqslant k)$，以 AS_i 与（10.18）作内积．则必有

$$C_i(AS_i, S_i) = 0$$

所以

$$(AS_i, S_i) = 0$$

这与 A 对称正定矛盾，所以必有 $C_i = 0$。即 S_0，S_1，…，S_k 线性无关．于是可知解向量 x^* 一定能用 S_0，S_1，…，S_{n-1} 线性表出。 证完。

定理2　(1) $r_{k+1}=b-Ax_{k+1}$。

(2) r_0，r_1，…，r_{k+1} 正交。

(3) S_0，S_1，…，S_{k+1} A正交。

(4) $r_k=g_k(A)r_0$，$g_k(t)$为某k次多项式。

(5) $S_k=f_k(A)r_0$，$f_k(t)$为某k次多项式。

证明　(1°) 当$k=0$时，(1) 成立，假定

$$r_k=b-Ax_k$$

则由公式(10.17)

$$\begin{aligned}b-Ax_{k+1}&=b-A(x_k+\alpha_kS_k)\\&=b-Ax_k-\alpha_kAS_k\\&=r_k-\alpha_kAS_k\\&=r_{k+1}\end{aligned}$$

即 (1) 成立。

(2°) 已证过 r_0，r_1 正交，S_0，S_1，A 正交，假定 r_0，r_1，…，r_k 正交，S_0，S_1,…，S_k A正交，以下证明

$$(r_{k+1},r_i)=0,\ (S_{k+1},AS_i)=0,\ i=0,1,\cdots,k$$

事实上，由公式构造过程知，在

$$(r_{k+1},\ r_k)=0$$

$$(S_{k+1},\ AS_k)=0$$

的条件下求得的 α_k，β_k。又由归纳法的假定及

$$r_{k+1}=r_k-\alpha_kAS_k$$

$$r_i=S_i-\beta_{i-1}S_{i-1}\qquad i=1,\ 2,\cdots,\ k-1$$

所以

$$\begin{aligned}(r_{k+1},\ r_i)&=(r_k-\alpha_kAS_k,\ r_i)\\&=-\alpha_k(AS_k,\ r_i)\\&=-\alpha_k(AS_k,\ S_i-\beta_{i-1}S_{i-1})\\&=0\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(S_{k+1},\ AS_i)&=(r_{k+1}+\beta_kS_k,\ AS_i)\\&=(r_{k+1},\ AS_i)\end{aligned}$$

$$=(\boldsymbol{r}_{k+1},\ \frac{1}{\alpha_i}(\boldsymbol{r}_{i+1}-\boldsymbol{r}_i))$$

$$=0$$

故(2)，(3)得证。(4)，(5)的证明留给读者。证完。

由于 $\boldsymbol{r}_0$，$\boldsymbol{r}_1$，…，$\boldsymbol{r}_k$ 是正交的，当其中无0向量时，它们是线性无关的。因为在 n 维空间中必有 $k<n$，故有 $\boldsymbol{r}_n=0$。所以得：用共轭斜量法解方程组（10．1）在无舍入误差的情况下，至多计算到 n 步即可得到方程组的精确解。由于计算时，很难没有舍入误差，所以 $\boldsymbol{r}_0$，$\boldsymbol{r}_1$，…，$\boldsymbol{r}_k$ 也很难精确地满足正交关系，从而可能出现 $\boldsymbol{r}_n\neq 0$，在这种情况下，需要重新开始应用共轭斜量法继续做下去，最后必能得到合乎要求的近似解。

例 用共轭斜量法解方程组

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

解 取 $\boldsymbol{x}_0=(0,\ 0,\ 0)^T$，列表计算如下：

	x_1	x_2	x_3	$(\boldsymbol{r}_k,\boldsymbol{r}_k)$	$(\boldsymbol{r}_k,\boldsymbol{r}_i)$	$(A\boldsymbol{S}_k,\boldsymbol{S}_k)$	$(A\boldsymbol{S}_k,\boldsymbol{S}_i)$	α_k	β_k
	2	−1	−1						
	−1	2	0						
	−1	0	1						
$\boldsymbol{b}$	0	1	0						
$\boldsymbol{x}_0$	0	0	0						
$\boldsymbol{r}_0$	0	1	0	1					
$\boldsymbol{S}_0$	0	1	0						
$A\boldsymbol{S}_0$	−1	2	0			2		$\frac{1}{2}$	
$\boldsymbol{x}_1$	0	$\frac{1}{2}$	0						
$\boldsymbol{r}_1$	$\frac{1}{2}$	0	0	$\frac{1}{4}$	0				$\frac{1}{4}$

	x_1	x_2	x_3	(r_k,r_k)	(r_l,r_i)	(AS_k,S_k)	(AS_k,S_i)	α_k	β_k
S_1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	0						
AS_1	$\frac{3}{4}$	0	$-\frac{1}{2}$			$\frac{3}{8}$	0	$\frac{2}{3}$	
x_2	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$	0						
r_2	0	0	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{9}$	0				$\frac{4}{9}$
S_2	$\frac{2}{9}$	$\frac{1}{9}$	$\frac{1}{3}$						
AS_2	0	0	$\frac{1}{9}$			$\frac{1}{27}$	0	3	
x_3	1	1	1						
r_3	0	0	0						

所以方程组的解为 $x_3=(1, 1, 1)^T=x^*$。

习 题 3.10

1　对公式（10.17）中的向量，证明

（1）$(x_k, AS_k)=0$，当 $x_0=0$ 时，$k\geqslant 1$

（2）$(r_k, S_{k-1})=0 \quad (k\geqslant 1)$。

（3）$\|x_{k+1}-x^*\|_2<\|x_k-x^*\|_2$。

（4）$(S_k, S_i)>0 \quad (k<i)$

2　用共轭斜量法计算

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & -2 \\ 2 & 5 & -4 \\ -2 & -4 & 5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

3　设 A 为对称正定矩阵，向量组

$S_0, S_1, \cdots, S_{n-1}$

为 A 正交的。证明

$$S^TAS=\bar{D}$$

其中S为以S_0，S_1，…，S_{n-1}为列向量作成的矩阵。

$$\overline{D}=[S_0^T A S_0,\ \cdots,\ S_{n-1}^T A S_{n-1}]$$

为对角阵。

然后证明：

$$A^{-1}=S\overline{D}^{-1}S^T$$

（这是一种计算逆矩阵A^{-1}的方法）。

§11 求矩阵特征值的幂方法

求矩阵的特征值特征向量，在实际问题中，有时需要求模最大的特征值；有时需要求所有的特征值；也有时需要求部分特征值及其相应的特征向量。在这一节中，我们主要讨论求模最大（小）特征值及其对应特征向量的幂方法。这是一种迭代法。

（一）幂 方 法

设A为n阶实矩阵，且其初等因子为一次的（比如对称阵，或特征值都不相同的矩阵就满足这一要求）。再设A的特征值为λ_i，其相应的特征向量为e_i，即

$$Ae_i=\lambda_i e_i,\ \text{或}(A-\lambda_i I)e_i=0 \tag{11.1}$$

其中I为n阶单位阵，$i=1, 2, \cdots, n$，且

$$|\lambda_1|\geqslant|\lambda_2|\geqslant\cdots\geqslant|\lambda_n|$$

我们的目的是求λ_1与e_1。

取初始向量$x_0(\neq 0)$，作迭代序列：

$$x_0,\ x_1=Ax_0,\ x_2=Ax_1,\ \cdots,\ x_k=Ax_{k-1},\ \cdots$$

现在来讨论序列$\{x_k\}$的收敛性。

因为特征向量e_1，e_2，…，e_n线性无关，所以构成线性空间R^n的基底。x_k可在基底上展开。设

$$
\left.\begin{aligned}
&x_0=\alpha_1e_1+\alpha_2e_2+\cdots+\alpha_ne_n\ (设\ \alpha_1\neq 0)\\
&x_1=Ax_0=\alpha_1\lambda_1e_1+\alpha_2\lambda_2e_2+\cdots+\alpha_n\lambda_ne_n\\
&x_2=Ax_1=\alpha_1\lambda_1^2e_1+\alpha_2\lambda_2^2e_2+\cdots+\alpha_n\lambda_n^2e_n\\
&\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\\
&x_k=Ax_{k-1}=\alpha_1\lambda_1^ke_1+\alpha_2\lambda_2^ke_2+\cdots+\alpha_n\lambda_n^ke_n
\end{aligned}\right\}\quad(11.2)
$$

所以

$$
x_k=\lambda_1^k\left[\alpha_1e_1+\alpha_2\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^ke_2+\cdots+\alpha_n\left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^ke_n\right]\quad(11.3)
$$

下面分三种情形来讨论：

（Ⅰ）当 λ_1 为实数，且 $\lambda_1>\lambda_2$ 时。

在此条件下，当 k 充分大时，

$\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^k$ 的模很小，$(n\geqslant i\geqslant 1)$

所以在（11．3)的右端方括号内第一项占主导地位，第二项开始以后的项可略去不计，便得

$$
x_k\doteq\alpha_1\lambda_1^ke_1\quad(11.4)
$$

以 $A-\lambda_1I$ 乘（11．4）两端，并注意（11．1）式，得

$$
(A-\lambda_1I)x_k\doteq\alpha_1\lambda_1^k(A-\lambda_1I)e_1=0
$$

所以

$$
Ax_k\doteq\lambda_1x_k\quad(11.5)
$$

这就是说 x_k 是A的第一特征向量的近似向量．为求λ_1，设

$$
x_k=(x_1^{(k)},\ x_2^{(k)},\ \cdots,\ x_n^{(k)})^T
$$

则由（11.5）知

$$
x_{k+1}=Ax_k\doteq\lambda_1x_k
$$

所以当 $x_i^{(k)}\neq 0$ 时，

$$
\lambda_1=\frac{x_i^{(k+1)}}{x_i^{(k)}},\quad(i=1,\ 2,\ \cdots,\ n)\quad(11.6)
$$

即 λ_1 的近似值可通过 x_{k+1} 与 x_k 的对应分量之比求得。

（Ⅱ）当 λ_1 为实数，且 $\lambda_2=-\lambda_1$，$|\lambda_2|>|\lambda_3|$时。

在此条件下，当 k 充分大时，

$\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^k$ 的模很小 $(i \geqslant 3)$

所以在（11．3）中右端第三项开始以后的项可略去不计，得

$$x_k \doteq \alpha_1 \lambda_1^k e_1 + (-1)^k \alpha_2 \lambda_1^k e_2 \qquad (11.7)$$

为求 e_1，注意到

$$(A - \lambda_1 I) e_1 = 0$$

$$(A - \lambda_2 I) e_2 = (A + \lambda_1 I) e_2 = 0$$

$$(A - \lambda_1 I)(A + \lambda_1 I) = (A + \lambda_1 I)(A - \lambda_1 I) = A^2 - \lambda_1^2 I$$

以 $(A - \lambda_1 I)(A + \lambda_1 I)$ 乘（11.7）的两端：

$$(A - \lambda_1 I)(A + \lambda_1 I) x_k \doteq \alpha_1 \lambda_1^k (A + \lambda_1 I)(A - \lambda_1 I) e_1 +$$

$$+ (-1)^k \alpha_2 \lambda_1^k (A - \lambda_1 I)(A + \lambda_1 I) e_2 = 0 \qquad (11.8)$$

于是有

$$(A - \lambda_1 I)(A x_k + \lambda_1 x_k) = (A - \lambda_1 I)(x_{k+1} + \lambda_1 x_k) \doteq 0$$

所以

$$A(x_{k+1} + \lambda_1 x_k) \doteq \lambda_1 (x_{k+1} + \lambda_1 x_k)$$

即 $x_{k+1} + \lambda_1 x_k$ 是A的第一特征向量。至于 λ_1，可如下计算：

因为

$$(A^2 - \lambda_1^2 I) x_k \doteq 0$$

$$A^2 x_k \doteq \lambda_1^2 x_k$$

所以

$$x_{k+2} \doteq \lambda_1^2 x_k$$

则当 $x_i^{(k)} \neq 0$ 时，

$$\lambda_1^2 = \frac{x_i^{(k+2)}}{x_i^{(k)}} \quad (i = 1,\ 2,\ \cdots,\ n) \qquad (11.9)$$

开方后便得 λ_1，$-\lambda_1$ 即 λ_2。

而对应于 λ_2 的特征向量，由（11.8）得

$$(A + \lambda_1 I)(A - \lambda_1 I) x_k \doteq 0$$

$$(A + \lambda_1 I)(A x_k - \lambda_1 x_k) \doteq 0$$

所以

$$A(x_{k+1}-\lambda_1 x_k) \doteq -\lambda_1(x_{k+1}-\lambda_1 x_k)$$
$$=\lambda_2(x_{k+1}-\lambda_1 x_k)$$

所以 $x_{k+1}-\lambda_1 x_k$ 是对应于 λ_2 的特征向量。

（Ⅱ）当 λ_1 为复数，且 $|\lambda_2|>|\lambda_3|$ 时。

因为 $Ae_1=\lambda_1 e_1$，　$(A-\lambda_1 I)e_1=0$

把 λ_1 换成它的共轭复数，把 e_1 的分量也换成其共轭复数，上面的等式仍然成立：

$$A\overline{e_1}=\overline{\lambda_1}\ \overline{e_1},\quad (A-\overline{\lambda_1}I)\overline{e_1}=0$$

故我们认为

$$\lambda_2=\overline{\lambda_1},\quad e_2=\overline{e_1}$$

又因为 A 与 x_0 为实的，所以

$$x_0=\alpha_1 e_1+\overline{\alpha_1}\ \overline{e_1}+\alpha_3 e_3+\cdots+\alpha_n e_n$$

$$x_k=\alpha_1\lambda_1^k e_1+\overline{\alpha_1}\ \overline{\lambda_1^k}\ \overline{e_1}+\cdots+\alpha_n\lambda_n^k e_n \tag{11.10}$$

当 k 充分大时，由于 $|\lambda_2|>|\lambda_3|$，所以（11.10）右端第一、二项占主导地位，第三项开始以后的项可略去不计，于是得

$$x_k\doteq\alpha_1\lambda_1^k e_1+\overline{\alpha_1}\ \overline{\lambda_1}^k\ \overline{e_1} \tag{11.11}$$

注意到

$$(A-\lambda_1 I)(A-\overline{\lambda_1}I)=(A-\overline{\lambda_1}I)(A-\lambda_1 I)$$

以 $(A-\lambda_1 I)(A-\overline{\lambda_1}I)$ 乘（11.11）两端：

$$(A-\lambda_1 I)(A-\overline{\lambda_1}I)x_k\doteq 0 \tag{11.12}$$

所以

$$(A-\lambda_1 I)(Ax_k-\overline{\lambda_1}x_k)\doteq 0$$
$$(A-\lambda_1 I)(x_{k+1}-\overline{\lambda_1}x_k)\doteq 0$$

则有

$$A(x_{k+1}-\overline{\lambda_1}x_k)\doteq\lambda_1(x_{k+1}-\overline{\lambda_1}x_k)$$

即　$x_{k+1}-\overline{\lambda_1}x_k$ 是A的第一特征向量。

为求 λ_1，设

$$\lambda_1 = u + iv, \quad \overline{\lambda}_1 = u - iv \tag{11.13}$$

则由 (11.12)

$$(A^2 - (\lambda_1 + \overline{\lambda}_1)A + \lambda_1\overline{\lambda}_1 I)x_k \doteq 0$$

$$A^2 x_k - (\lambda_1 + \overline{\lambda}_1)Ax_k + \lambda_1\overline{\lambda}_1 x_k \doteq 0$$

所以

$$x_{k+2} - 2ux_{k+1} + (u^2 + v^2)x_k \doteq 0$$

由此可得 x_{k+2}, x_{k+1}, x_k 的分量间的关系:

$$x_i^{(k+2)} - 2ux_i^{(k+1)} + (u^2 + v^2)x_i^{(k)} \doteq 0 \tag{11.14}$$

当取 $i = 1$, 2 时，得关于未知量 $2u$ 及$u^2 + v^2$ 的方程组，从中解出 u 及 v，代入(11.13) 便得 λ_1 及 $\overline{\lambda}_1$，而对应于 $\overline{\lambda}_1$ 的近似特征向量，不难求出，它是

$$x_{k+1} - \lambda_1 x_k$$

现在的问题是如何判断所求矩阵的第一特征值是属于哪一种情况? 从经验上来说，这可由迭代向量的分量的数值变化情况来判定。

在第(Ⅰ)种情形，迭代向量的分量的数值变化是单调的，并有近似关系式

$$\frac{x_i^{(k+1)}}{x_i^{(k)}} \doteq \frac{x_i^{(k)}}{x_i^{(k-1)}} \doteq \frac{x_i^{(k-1)}}{x_i^{(k-2)}} \quad (i = 1, 2, \cdots, n) \tag{11.15}$$

在第（Ⅱ）种情形，分量的变化不是单调的，但也有规律性，并粗糙地有关系式

$$\frac{x_i^{(k+2)}}{x_i^{(k)}} \doteq \frac{x_i^{(k+1)}}{x_i^{(k-1)}} \doteq \frac{x_i^{(k)}}{x_i^{(k-2)}}, \quad i = 1, 2, \cdots, n$$

在第(Ⅲ)种情形，分量的变化很不规则，不论是分量的绝对值还是符号，变动都很大。这是因为在公式(11.11)中，若令

$$\lambda_1 = r \cdot e^{i\varphi}, \quad a_1 e_j^{(1)} = \rho_j e^{i\theta}$$

其中 $e_j^{(1)}$ 为 e_1 的第 j 个分量，则 x_k 的分量

$$x_j = 2r^k \rho_j coo(k\varphi + \theta)$$

中含有余弦函数的关系。

例　求矩阵 $A=\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$

的第一特征值及其对应的特征向量。

解　取 $x_0=(1,\ 1,\ 1)^T$。计算结果如下表：

	2 -1 0	-1 2 -1	0 -1 2
x_0	1	1	1
x_1	1	0	1
x_2	2	-2	2
x_3	6	-8	6
x_4	20	-28	20
x_5	68	-96	68
x_6	232	-328	232
x_7	792	-1120	792
$x_i^{(7)}/x_i^{(6)}$	3.414	3.415	3.414

因此 $\lambda_1 \doteq 3.41$，对应于 λ_1 的特征向量可取 x_6。以 x_6 的第2个分量的模（模最大）除各分量，使 x_6 规格化，得

$$e_1 \doteq (0.707,\ -1,\ 0.707)^T$$

事实上，A 的特征值 λ_1 的精确值不难求得，

$$\lambda_1 = 2+\sqrt{2},\ \lambda_2 = 2,\ \lambda_3 = 2-\sqrt{2}$$

故 $|\lambda_1 - 3.41| = 0.001\cdots$，而第一特征向量为

$$e_1 = \left(\frac{\sqrt{2}}{2},\ \ -1,\ \frac{\sqrt{2}}{2}\right)^T \doteq (0.707,\ -1,\ 0.707)^T$$

其分量的绝对误差界为0.001。

（二）内积加快法

如果阵A是对称的，则有求λ_1的加快收敛法——内积加快法。

因为A是对称的，故设其特征向量e_1，e_2，…，e_n为标准正交的．由于

$$x_k = \alpha_1\lambda_1^k e_1 + \alpha_2\lambda_2^k e_2 + \cdots + \alpha_n\lambda_k^k e_n$$

$$x_{k-1} = \alpha_1\lambda_1^{k-1} e_1 + \alpha_2\lambda_2^{k-1} e_2 + \cdots + \alpha_n\lambda_n^{k-1} e_n$$

所以作内积

$$(x_k, x_k) = \alpha_1^2\lambda_1^{2k} + \alpha_2^2\lambda_2^{2k} + \cdots + \alpha_n^2\lambda_n^{2k}$$

$$(x_k,\ x_{k-1}) = \alpha_1^2\lambda_1^{2k-1} + \alpha_2^2\lambda_2^{2k-1} + \cdots + \alpha_n^2\lambda_n^{2k-1}$$

$$(x_{k-1},\ x_{k-1}) = \alpha_1^2\lambda_1^{2k-2} + \alpha_2^2\lambda_2^{2k-2} + \cdots + \alpha_n^2\lambda_n^{2k-2}$$

对第(Ⅰ)种情形，当k充分大时，

$$(x_k,\ x_k) \doteq \alpha_1^2\lambda_1^{2k}$$

$$(x_k,\ x_{k-1}) \doteq \alpha_1^2\lambda_1^{2k-1}$$

所以

$$\lambda_1 \doteq \frac{(x_k,\ x_k)}{(x_k,\ x_{k-1})} \tag{11.16}$$

对第(Ⅱ)种情形，当k充分大时，

$$(x_k,\ x_k) \doteq \alpha_1^2\lambda_1^{2k}$$

$$(x_{k-1},\ x_{k-1}) \doteq \alpha_1^2\lambda_1^{2k-2}$$

所以

$$\lambda_1^2 \doteq \frac{(x_k,\ x_k)}{(x_{k-1},\ x_{k-1})} \tag{11.17}$$

公式(11.16)，(11.17)之所以比公式(11.6)，(11.9)精度高，是因为如对第(Ⅰ)种情形有等式

$$(x_k,\ x_k) = \lambda_1^{2k}\left[\alpha_1^2 + \alpha_2^2\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{2k} + \cdots + \alpha_n^2\left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^{2k}\right]$$

等式右端方括号内的$\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^{2k}$ $(i>1)$ 是以 $2k$ 次方的速度减小

的．而在(11.3)中却是以k次方的速度减小的．

例如，对上面的例题，矩阵A刚好是对称的．我们有

$$\boldsymbol{x}_3=(20,\ -28,\ 20)^T,\quad \boldsymbol{x}_4=(68,\ -96,\ 68)^T$$

$$(\boldsymbol{x}_4,\ \boldsymbol{x}_4)=18464,\quad (\boldsymbol{x}_4,\ \boldsymbol{x}_3)=5408$$

由(11.16)得

$$\lambda_1 \doteq \frac{18464}{5408}=3.4142$$

有5位有效数字．而按(11.6)计算，$\boldsymbol{x}_4$与$\boldsymbol{x}_3$的分量之比，只能有两位有效数字，$\lambda_1 \doteq 3.4$．

(三) 反　幂　法

反幂法是用来求矩阵A的模最小($\neq 0$)特征值的迭代法，又称为反迭代法．还在(一)的假设的基础上，设$\lambda_n \neq 0$，则A^{-1}存在，A与A^{-1}的特征值特征向量之间的关系是

$$A\boldsymbol{e}_i=\lambda_i\boldsymbol{e}_i$$

而

$$A^{-1}\boldsymbol{e}_i=\frac{1}{\lambda_i}\boldsymbol{e}_i$$

按模的大小排列：

$$\frac{1}{|\lambda_n|}\geqslant\frac{1}{|\lambda_{n-1}|}\geqslant\cdots\geqslant\frac{1}{|\lambda_1|}$$

所以任取非O初始向量$\boldsymbol{x}_0$按幂法作迭代

$$A^{-1}\boldsymbol{x}_k=\boldsymbol{x}_{k+1} \tag{11.18}$$

从理论上可求出$1/\lambda_n$，即可得λ_n．但A^{-1}往往是未知的，所以实际上并不按(11.18)式计算，将(11.18)变形

$$A\boldsymbol{x}_{k+1}=\boldsymbol{x}_k,\quad k=0,\ 1,\ 2,\ \cdots \tag{11.19}$$

由已知的$\boldsymbol{x}_k$求$\boldsymbol{x}_{k+1}$，变成解线性方程组(11.19)，实际计算时，先把A作三角分解（假设可能）

$$A=LU$$

其中L为单位下三角阵，U是上三角阵，那么解(11.19)就

变为解两个三角系数阵的方程组：

$$\left.\begin{array}{l} L\boldsymbol{y} = \boldsymbol{x}_k \\ U\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{y} \end{array}\right\} \qquad (11.20)$$

这比直接解（11.19)可节省很多工作量。当 k 充分大时，若在第(Ⅰ)种情形，通过 $\boldsymbol{x}_k$ 与 $\boldsymbol{x}_{k+1}$ 的分量之比即可求得 λ_n。

习　　题　3.11

1　求矩阵A的模最大特征值及其相应的特征向量。

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

2　求矩阵 B的模最大特征值及相应特征向量。

$$B = \begin{pmatrix} 5 & 4 & -4 \\ 11 & 8 & -8 \\ 13 & 13 & -12 \end{pmatrix}$$

3　设阵 $A = (a_{ij})$的特征值 λ_i 非负，且 λ_1 最大。

$$S_p A = \sum_{i=1}^{n} a_{ii}$$

求证

$$\operatorname{Sp} A = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i, \quad \lim_{k\to\infty} \sqrt[k]{\operatorname{Sp} A^k} = \lambda_1$$

4　设解线性代数方程组的简单迭代程序为

$$y_{k+1} = A y_k + f$$

收敛于方程组的解 y^*，阵A满足幂方法的第Ⅰ种情形，求证

$$y^* = y_k + \frac{y_{k+1} - y_k}{1 - \lambda_1}$$

[提示：注意（11.5)，当 k 充分大时，

$$y^* - y_{k+1} = A(y^* - y_k) \doteq \lambda_1 (y^* - y_k)]$$

5　设有 n 次实系数多项式

$$\varphi(t)=t^n-a_1t^{n-1}-\cdots-a_{n-1}t-a_n$$

验证矩阵

$$A=\begin{pmatrix} a_1 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ a_2 & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \ddots & \vdots \\ a_{n-1} & 0 & \cdots & & \ddots & 1 \\ a_n & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

的特征多项式就是 $\varphi(t)$，并证明按幂法（假定$\varphi(t)$无重根）作迭代

$$x_{k+1}=Ax_k,\quad k=0,\ 1,\ 2,\ \cdots$$

则 x_{k+1} 与 x_k 的分量满足下列关系式

$$x_i^{(k+1)}=a_ix_1^{(k)}+x_{i+1}^{(k)},\quad i=1,\ 2,\ \cdots,\ n-1$$

$$x_n^{(k+1)}=a_nx_1^{(k)}$$

从而可求出 $\varphi(t)$ 的按模最大特征值。

6　设 n 阶阵 A 满足（11.1）的假设，并满足第（Ⅰ）种条件，任取 $y_0(\neq 0)$对 A^T 作迭代

$$y_{k+1}=A^Ty_k,\quad k=0,\ 1,\ 2,\ \cdots$$

则当 k 充分大时，

$$\frac{(x_k,\ y_k)}{(x_k,\ y_{k-1})}\doteq\lambda_1$$

〔提示：设 u_i 为 A^T 的特征向量，则

$(u_i,\ e_j)=0(i\neq j)$〕

§12　求实对称矩阵的特征值的二分法

首先考虑，对称三对角阵特征值的计算，然后再讨论一般对称阵的情形。

（一）实对称三对角阵的施特姆序列

设实对称三对角阵

$$B = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & & & & 0 \\ b_1 & a_2 & b_2 & & & \\ & b_2 & a_3 & b_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & b_{n-2} & a_{n-1} & b_{n-1} \\ 0 & & & & b_{n-1} & a_n \end{pmatrix}$$

其中 $b_i \neq 0$。设 $p_r(\lambda)$ 是 $B-\lambda I$ 的 r 阶主子式

$$P_r(\lambda) = \begin{vmatrix} a_1-\lambda & b_1 & & & 0 \\ b_1 & a_2-\lambda & b_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & b_{r-2} & a_{r-1}-\lambda & b_{r-1} \\ 0 & & & b_{r-1} & a_r-\lambda \end{vmatrix}$$

$P_n(\lambda)=\det(B-\lambda I)$，于是多项式 $P_n(\lambda)$ 的根就是矩阵 B 的特征值．令 $P_0(\lambda)=1$，则容易算出

$$P_1(\lambda) = a_1 - \lambda$$

$$P_2(\lambda) = (a_2-\lambda)P_1(\lambda) - b_1^2 P_0(\lambda)$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$P_r(\lambda) = (a_r-\lambda)P_{r-1}(\lambda) - b_{r-1}^2 P_{r-2}(\lambda) \qquad (12.1)$$

$$r=1,\ 2,\ \cdots,\ n,\quad b_0=0$$

显然 $P_r(\lambda)$ 的首系数是 $(-1)^r$

$$P_0(\lambda),\ P_1(\lambda),\ P_2(\lambda),\ \cdots,\ P_n(\lambda) \qquad (12.2)$$

的次数是偶奇相间的．我们称多项式序列(12.2)为阵 B 的施特姆序列。

定义 $S(\alpha)$ 为当 $\lambda=\alpha$ 时，序列

$$P_0(\alpha),\ P_1(\alpha),\ P_2(\alpha),\ \cdots,\ P_n(\alpha) \qquad (12.3)$$

中相邻二数同号的个数（如果某个 $P_r(\alpha)=0$，就取 $P_r(\alpha)$ 的符

号与 $P_{r-1}(\alpha)$的符号相同）．例如当

+ + 0 − + − −

时，$S(\alpha)=3$

序列（12.2）具有以下性质：

1 $P_0(\lambda)$无实根。

2 $P_{r-1}(\lambda)$与$P_r(\lambda)$无公共根。

事实上，在（12.1）中，如果$\overline{\lambda}$是$P_{r-1}(\lambda)$与$P_r(\lambda)$的共公根，由$b_i\neq 0$，则$\overline{\lambda}$也是$P_{r-2}(\lambda)$的根，依此推下去，$\overline{\lambda}$也是$P_1(\lambda)$，$P_2(\lambda)$的公共根，导出$P_0(\lambda)=0$，这是不可能的。

3 若 $P_{r-1}(\alpha)=0$，则

$$P_r(\alpha)P_{r-2}(\alpha)<0$$

由（12.1）知这是显然的。

性质3说明，当λ经过$P_{r-1}(\lambda)$的根时，（12.3）中的同号个数不变。

4 $P_{r-1}(\lambda)$与$P_r(\lambda)$的根是严格相间的，即$P_r(\lambda)$无重根。

用数学归纳法证明如下：

（1）当 $r=2$ 时，设$P_1(\lambda)$ 的根为β，$P_2(\lambda)$ 的二根为α_1，α_2，则由3知

$$P_2(\beta)P_0(\beta)<0$$

但 $P_0(\beta)>0$，故 $P_2(\beta)<0$，又因 $P_2(\lambda)$ 是首系数等于1的二次多项式，当$|\lambda|$充分大时，$P_2(\lambda)>0$，所以在区间

$$(-\infty,\ \beta),\ (\beta,\ +\infty)$$

内各有$P_2(\lambda)$的一个根．从而$r=2$时，4的结论成立。

（2）假定 $r=k$ 时，4的结论成立，求证 $r=k+1$ 时，4的结论也成立：

事实上，设 $P_k(\lambda)$的根由小到大排列为

$$\beta_1,\ \beta_2,\ \cdots,\beta_k$$

由假定知必有

$$P_{k-1}(\beta_i)P_{k-1}(\beta_{i+1})<0,\ 1\leqslant i\leqslant k-1$$

不失一般性，设在区间$[\beta_i, \beta_{i+1}]$的端点上，

$$P_{k-1}(\beta_i)>0, \quad P_{k-1}(\beta_{i+1})<0 \tag{12.4}$$

见（图 3.2）

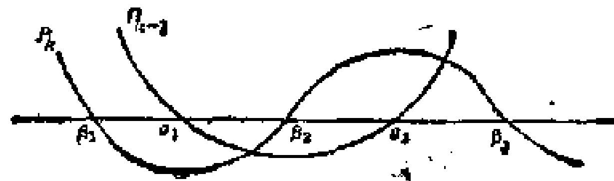


图 3.2

再由3知

$$P_{k+1}(\beta_i)P_{k-1}(\beta_i)<0$$
$$P_{k+1}(\beta_{i+1})P_{k-1}(\beta_{i+1})<0$$

所以

$$P_{k+1}(\beta_i)<0, \quad P_{k+1}(\beta_{i+1})>0 \tag{12.5}$$

则 $P_{k+1}(\lambda)$ 在区间(β_i, β_{i+1}) 内至少有一个根，$i=1,2,\cdots,k-1$。

又因 $P_{k+1}(\lambda)$ 与 $P_{k-1}(\lambda)$ 的最高次数的奇偶性相同，所以当$|\lambda|$充分大时，$P_{k+1}(\lambda)$与$P_{k-1}(\lambda)$同号，在区间$(-\infty, \beta_1]$上，$P_{k-1}(\lambda)$ 无根，由（12.4）知 $P_{k-1}(\beta_1)<0$，从而可知在该区间上当 $|\lambda|$ 充分大时，$P_{k+1}(\lambda)<0$。再由（12.5）可得 $P_{k+1}(\lambda)$在$(-\infty, \beta_1]$内有一个根，同理可知 $P_{k+1}(\lambda)$ 在$[\beta_k, +\infty)$ 内也有一个根。综上所述可知 $p_{k+1}(\lambda)$在下列区间内各有一个根：

$$(-\infty, \beta_1), \ (\beta_1, \beta_2), \ \cdots, \ (\beta_{k-1}, \beta_k), \ (\beta_k, +\infty)$$

共有 $n+1$ 个根，它们与 $P_k(\lambda)$的根 $\{\beta_i\}$ 严格相间，性质4证完。

5　设α为任意实数，则$S_n(\alpha)$等于$P_n(\lambda)$ 大于α的根的个数。

证明　用数学归纳法论证。

当 $n=1$ 时成立。

事实上，对任意实数a分区间为$(-\infty, a)$，$(a, +\infty)$，因为$P_1(-\infty)>0$，若$P_1(a)<0$，$P_1(\lambda)<0$，在$(a, +\infty)$无根，这时因$P_0(a)>0$与$P_1(a)$异号，所以

$$S_1(a)=0$$

若$P_1(a)>0$，而$P_1(+\infty)<0$，所以$p_1(\lambda)$在$(a, +\infty)$有一根，这时因$P_0(\lambda)>0$与$P_1(a)$同号，所以

$$S_1(a)=1$$

设$n=k$时成立。

假定$p_0(a)$，$p_1(a)$，…，$p_n(a)$同号个数$S_n(a)=r$，$p_k(\lambda)$的根为

$$x_1>x_2>\cdots>x_r>x_{r+1}>\cdots>x_k$$

则有

$$x_1>x_2>\cdots>x_r>a>x_{r+1}>\cdots>x_k$$

当$n=k+1$时，设$P_{k+1}(\lambda)$的根为

$$y_1>y_2>\cdots>y_r>y_{r+1}>\cdots>y_{k+1}$$

根据性质4有

$$y_1>x_1>\cdots>y_r>x_r>y_{r+1}>x_{r+1}>\cdots>x_k>y_{k+1}$$

由于

$$P(a)=\prod_{i=1}^{k}(x_i-a) \tag{12.6$_1$}$$

$$P_{k+1}(a)=\prod_{i=1}^{k+1}(y_i-a) \tag{12.6$_2$}$$

关于a的取法有下面三种可能：

1° 如果$x_r>a>y_{r+1}$，由$(12.6)_1$，$(12.6)_2$知$P_{k+1}(a)$，$P_k(a)$异号，于是

$$S_{k+1}(a)=S_k(a)=r$$

而$P_{r+1}(\lambda)$大于a的根的个数也为r。

2° 如果$y_{r+1}>a>x_{r+1}$，则$P_{k+1}(a)$与$P_k(a)$同号，于是

$$S_{k+1}(a)=r+1$$

而 $P_{r+1}(\lambda)$ 大于 a 的根的个数也为 $r+1$

3° 如果 $y_{k+1}=a$，$P_{k+1}(a)=0$，根据符号规定与 $P_r(a)$ 取同号，于是

$$S_{k+1}(a)=r+1$$

而 $P_{k+1}(\lambda)$ 大于 a 的根的个数也为 $r+1$。

由此可知 $S_{k+1}(a)$ 刚好等于 $P_{k+1}(\lambda)$ 大于 a 的根的个数。$k=1,2,\cdots,n-1$。证完。

（二）求实对称三对角阵的特征值的二分法

由前述阵 B 的施特姆序列的性质得：

定理 1 设有二实数 a，$b(a<b)$，则矩阵 B 在区间 $[a, b]$ 内特征值的个数等于 $S(a)-S(b)$，特别当 $S(a)=k+1$，$S(b)=k$ 时，$[a, b]$ 内只有阵 B 的一个特征值。

由 § 7 引理知，

$$-\|B\|_\infty\leqslant\lambda_i\leqslant\|B\|_\infty$$

记

$$a=-\|B\|_\infty,\ b=\|B\|_\infty$$

即

$$a\leqslant\lambda_i\leqslant b$$

为此要求某个特征值时，取 $a_1=\dfrac{a+b}{2}$，计算 $S(a_1)$，根据本节性质 5 判断根在 $(-\infty, a_1)$ 或 $(a_1+\infty)$ 区间，然后再继续用二分法取值，进行判断，直到发现所求特征值存在于 $[a_k, b_k]$ 内时，一方面可用此办法继续缩小区间提高精度。这在计算 $S(a_k)$ 时，需要计算 n 个方程 $P_k(a)$ 的值，当然也可用第二章讲的其他求根办法进行，直到满足精度要求为止。由做法可知，区间二分法可求矩阵 B 的任意特征值，这是此法的特点。

至于求对应于 λ_i 的特征向量，一个数值稳定的解法是反迭代法，迭代程序如下：

$$\left.\begin{aligned}(\boldsymbol{B}-\lambda_i\boldsymbol{I})\boldsymbol{x}_{k+1}&=\boldsymbol{y}_k\\ \boldsymbol{y}_{k+1}&=\boldsymbol{x}_{k+1}/\|\boldsymbol{x}_{k+1}\|\end{aligned}\right\}\tag{12.6}$$

其中 $\boldsymbol{y}_0\neq 0$，为任意的向量，$k=0,1,2,\cdots$，直到 $\boldsymbol{y}_k\to 0(k\to\infty)$，$\boldsymbol{x}_{k+1}$，即为所求。

（三）实对称矩阵的三对角化

为用上述区间二分法求任意实对称矩阵的任一特征值，需先将实对称矩阵三对角化。下面介绍一种数值稳定的实用的方法。首先介绍一种消元矩阵——初等反射矩阵。

初等反射矩阵，也叫平面反射矩阵。它是这样建立起来的。

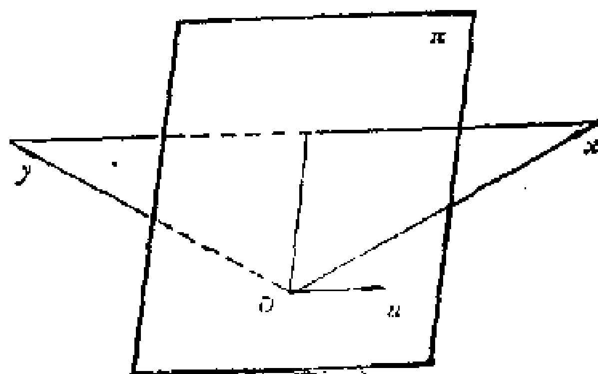


图 3.3

设 $\boldsymbol{x}\in \boldsymbol{R}^n$ 为任一非 O 向量，向量 $\boldsymbol{y}$ 为 $\boldsymbol{x}$ 关于过原点的平面 π 的镜像：如图 3.3，则

$$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{x}-2(\boldsymbol{u}^T\boldsymbol{x})\boldsymbol{u}$$

其中向量 $\boldsymbol{u}$ 为平面 π 的单位法向量，$\|\boldsymbol{u}\|=1$。

由于

$$(\boldsymbol{u}^T\boldsymbol{x})\boldsymbol{u}=\boldsymbol{u}(\boldsymbol{u}^T\boldsymbol{x})=(\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T)\boldsymbol{x}$$

则

$$\boldsymbol{y}=(\boldsymbol{I}-2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T)\boldsymbol{x}\tag{12.7}$$

令

$$\boldsymbol{H}=\boldsymbol{I}-2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T,\ \|\boldsymbol{u}\|=1\tag{12.8}$$

则（12.7）成为

$$\boldsymbol{H}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}\tag{12.9}$$

我们称阵 $\boldsymbol{H}$ 为平面反射变换或初等反射矩阵。

容易验证矩阵$\boldsymbol{H}$有下列性质：

(i) $\boldsymbol{H}$为对称矩阵，$\boldsymbol{H}^T=\boldsymbol{H}$；

(ii) $\boldsymbol{H}$为正交矩阵，$\boldsymbol{H}^T\boldsymbol{H}=\boldsymbol{H}\boldsymbol{H}^T=\boldsymbol{I}$；

(iii) $\boldsymbol{H}^2=\boldsymbol{I}$。

初等反射矩阵的主要特性，在于适当选取向量 $\boldsymbol{u}$，可使向量 $\boldsymbol{x}$的很多分量变为 0，从而简化计算。又由于$\boldsymbol{H}$是正交变换，故向量 $\boldsymbol{x}$在变换后，其长度不变，$\|\boldsymbol{y}\|_2=\|\boldsymbol{x}\|_2$。

定理 2　设 $\boldsymbol{x}$，$\boldsymbol{y}\in R^n$，$\|\boldsymbol{x}\|_2=\|\boldsymbol{y}\|_2$，则存在初等反射矩阵$\boldsymbol{H}$，使 $\boldsymbol{H}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$。

证明　若 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$，只要取 $\boldsymbol{u}$ 满足 $\boldsymbol{u}^T\boldsymbol{x}=0$，则

$$\boldsymbol{H}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}-2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$$

若 $\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{y}$，则用待定法，令

$$\boldsymbol{H}\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{I}-2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T)\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$$

则有

$$-2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}$$

所以

$$2(\boldsymbol{u}^T\boldsymbol{x})\boldsymbol{u}=\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}$$

即应取 $\boldsymbol{u}$ 与向量 $\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}$ 平行，因 $\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{y}$，故$\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|_2>0$。从而取

$$\boldsymbol{u}=\frac{\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}}{\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|_2} \tag{12.10}$$

显然$\|\boldsymbol{u}\|_2=1$，注意到

$$\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|_2^2=2(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})^T\boldsymbol{x}$$

容易验证这样取$\boldsymbol{u}$，作的矩阵$\boldsymbol{H}$，确有$\boldsymbol{H}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$。

事实上

$$\begin{aligned}\boldsymbol{H}\boldsymbol{x}&=(\boldsymbol{I}-2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T)\boldsymbol{x}\\&=\boldsymbol{x}-2\frac{(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})^T\boldsymbol{x}}{\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|_2^2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\\&=\boldsymbol{x}-(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})=\boldsymbol{y}\end{aligned}$$　证完。

定理 3 设A为任意n阶实对称矩阵，则用初等反射矩阵，对A逐次作相似变换，总可使A化为对称三对角阵。

证明 设

$$A_1 = A = \begin{pmatrix} a_{11} & \vdots & b_1^T \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ b_1 & \vdots & B_1 \end{pmatrix}$$

$$b_1 = (a_{21}, a_{31}, \cdots, a_{n1})^T \neq 0$$

选取初等反射阵 $H_1 = I - 2u_1u_1^T$，$\|u_1\| = 1$，使

$$A_2 = H_1A_1H_1 = \begin{pmatrix} a_{11} & \vdots & b_2^T \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ b_2 & \vdots & B_2 \end{pmatrix}$$

$$b_2 = (c_1, 0, \cdots, 0)^T$$

C_1为待定数，而 b_1 变为 b_2，要求有

$$\|b_1\|_2 = \|b_2\|_2, \quad B_1 \text{ 变为 } B_2$$

如果 $b_1 = b_2$，那么问题就不存在了。

设 $b_1 \neq b_2$，由 $\|b_1\|_2 = \|b_2\|_2$，得

$$\sum_{i=2}^{n} a_{i1}^2 = C_1^2$$

则有

$$C_1 = \pm\left(\sum_{i=2}^{n} a_{i1}^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

令

$$\sigma_1 = \left(\sum_{i=2}^{n} a_{i1}^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

则

$$C_1 = \pm\sigma_1$$

根据定理 2，有

$$\omega_1 = b_1 - b_2 = (a_{21} + sgn(a_{21})\sigma_1, a_{31}, \cdots, a_{n1})^T$$

为计算的稳定性，防止两个相近的数相减，为此选σ_1的符号与 a_{21} 的符号相同，这样选取对U_1无影响，于是

$$\|b_1 - b_2\|_2 = [2(\sigma_1^2 + |a_{21}|\sigma_1)]^{\frac{1}{2}}$$

所以取

$$\nu_1 = \frac{\boldsymbol{b}_1 - \boldsymbol{b}_2}{\|\boldsymbol{b}_1 - \boldsymbol{b}_2\|_2}$$

则得 $n-1$ 阶初等反射矩阵 $\boldsymbol{U}_1$：

$$\boldsymbol{U}_1 = \boldsymbol{I}_{n-1} - 2\nu_1\nu_1^T = \boldsymbol{I}_{n-1} - \alpha_1\omega_1\omega_1^T$$

其中

$$\alpha_1 = \frac{1}{\sigma_1^2 + |a_{21}|\sigma_1} \tag{12.11}$$

$$\boldsymbol{U}_1 b_1 = (-\operatorname{sgn}(a_{21})\sigma_1, \ 0, \ \cdots, \ 0)^T = \boldsymbol{b}_2$$

令

$$\boldsymbol{H}_1 = \begin{pmatrix} \boldsymbol{I} & 0 \\ 0 & U_1 \end{pmatrix} = \boldsymbol{I} - 2\boldsymbol{u}_1\boldsymbol{u}_1^T$$

其中

$$\boldsymbol{u}_1 = \frac{(0, \ a_{21} + \operatorname{sgn}(a_{21})\sigma_1, a_{31}, \cdots, a_{n1})^T}{\sqrt{2(\sigma_1^2 + |a_{21}|\sigma_1)}}$$

$$\|\boldsymbol{u}_1\| = 1$$

则

$$\boldsymbol{A}_2 = \boldsymbol{H}_1\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{H}_1 = \begin{pmatrix} a_{11} & \vdots\ b_1^T U_1 \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ U_1 b_1 & \vdots\ U_1 B_1 U_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & \vdots\ \boldsymbol{b}_2^T \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ \boldsymbol{b}_2 & \vdots\ \boldsymbol{B}_2 \end{pmatrix}$$

其中 $\boldsymbol{b}_2 = \boldsymbol{U}_1\boldsymbol{b}_1$ 为 $n-1$ 维列向量，除第一个分量外，其余的皆为0。

$$\boldsymbol{B}_2 = \boldsymbol{U}_1\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{U}_1 = \boldsymbol{B}_2^T$$

假定已作到 A_i 的前 $i-1$ 列及第 $i-1$ 行三对角化了。设

$$\boldsymbol{A}_i = \begin{pmatrix} \boldsymbol{D}_i & & \vdots\ 0 \\ & & \cdots\cdots \\ & & \vdots\ \boldsymbol{b}_i^T \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ 0 & \vdots\ \boldsymbol{b}_i & \vdots\ \boldsymbol{B}_i \end{pmatrix}$$

其中 D_i 为 i 阶对称三对角块，B_i 为 $n-i$ 阶方块。$\boldsymbol{b}_i$ 为 $n-i$ 维列向量。为方便计，记之为

$$\boldsymbol{b}_i = (a_{i+1, i}, a_{i+2, i}, \cdots, a_{n i})^T$$

由定理 2 知存在 $n-i$ 阶初等反射阵

$$U_i = I_{n-i} - \alpha_i \omega_i \omega_i^T$$

使得

$$U_i b_i = b_{i+1}$$

其中

$$b_{i+1} = (-\mathrm{sgn}(a_{i+1,i})\sigma_i, 0, \cdots, 0)$$

$n-i$维列向量。

$$\sigma_i = (a_{i+1,i}^2 + a_{i+2,i}^2 + \cdots + a_{ni}^2)^{\frac{1}{2}}$$

$$\alpha_i = 1/(\sigma_i^2 + |a_{i+1,i}|\sigma_i)$$

令

$$\omega_i = (a_{i+1,i} + \mathrm{sgn}(a_{i+1,i})\sigma_i, a_{i+2,i} \cdots, a_{ni})^T$$

$$H_i = \begin{pmatrix} I_i & O \\ O & U_i \end{pmatrix} \tag{12.12}$$

其中 I_i 为 i 阶单位阵，则H_i 为 n 阶初等反射阵，而

$$A_{i+1} = H_i A_i H_i = \left(\begin{array}{c:c:c} \multicolumn{2}{c:}{D_i} & 0 \\ \hdashline \multicolumn{2}{c:}{} & b_i^T U_i \\ \hdashline 0 & U_i b_i & U_i B_i U_i \end{array}\right)$$

因为$U_i b_i = b_{i+1}$ 除第一个分量外，其余的皆为 0，所以这时可记

$$A_{i+1} = \left(\begin{array}{c:c:c} \multicolumn{2}{c:}{D_{i+1}} & O \\ \hdashline \multicolumn{2}{c:}{} & b_{i+1}^T \\ \hdashline O & b_{i+1} & B_{i+1} \end{array}\right)$$

其中D_{i+1}为$i+1$阶对称三角块，b_{i+1}为$n-i-1$维列向量，B_{i+1}为$n-i-1$阶方块。

重复上述步骤，直到做完第$n-2$次变换，得

$$\begin{aligned} A_{n-1} &= H_{n-2} A_{n-2} H_{n-2} \\ &= H_{n-2} H_{n-1} \cdots H_1 A_1 H_1 \cdots H_{n-1} H_{n-2} \end{aligned} \tag{12.13}$$

A_{n-1}为对称三对角阵。证完。

由于H_i是对称正交矩阵，故上述各次变换为对称正交相似变换。因而定理 3 又可叙述为：

对任意 n 阶实对称矩阵 A，都存在对称正交相似变换，使 A 与一个对称三对角阵相似。

至于A_{i+1}的具体计算公式可导出如下： 设

$$\sigma_i = (a_{i+1,i}^2 + a_{i+2,i}^2 + \cdots + a_{n,i}^2)^{\frac{1}{2}}$$

$$\overline{\omega}_i = (\underbrace{0, \cdots, 0}_{i个}, a_{i+1,i} + \text{sgn}(a_{i+1,i})\sigma_i, a_{i+2,i}, \cdots, a_{n,i})^T \tag{12.14}$$

$$\alpha_i = \frac{1}{\sigma_i^2 + |a_{i+1,i}|\sigma_i}$$

则 (12.12) 的H_i可记为

$$H_i = I - \alpha_i \overline{\omega}_i \overline{\omega}_i^T$$

令

$$\left.\begin{aligned} P_i &= \alpha_i A_i \overline{\omega}_i \\ k_i &= \frac{1}{2}\alpha_i \overline{\omega}_i^T P_i \\ q_i &= p_i - k_i \overline{\omega}_i \end{aligned}\right\} \tag{12.15}$$

则

$$\begin{aligned} A_{i+1} &= H_i A_i H_i = (I - \alpha_i \overline{\omega}_i \overline{\omega}_i^T) A_i (I - \alpha_i \overline{\omega}_i \overline{\omega}_i^T) \\ &= A_i - \overline{\omega}_i P_i^T - P_i \overline{\omega}_i^T + \alpha_i \overline{\omega}_i \overline{\omega}_i^T P_i \overline{\omega}_i^T \\ &= A_i - (\overline{\omega}_i q_i^T + q_i \overline{\omega}_i^T) \end{aligned} \tag{12.16}$$

$$i = 1, 2, , \cdots, n-2$$

按公式 (12.16) 即可逐次算出 A_i，使 $A_1 = A$ 三对角化。

习 题 3.12

1 求初等反射矩阵，使向量

$x = (1, 2, 3, \sqrt{2})^T$

的第 2，3，4 分量化为 0。

2 求下列矩阵的施特姆序列，并判断它是否为负定矩阵：

$$A=\begin{pmatrix} -2 & 1 & & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \\ & 1 & -2 & 1 \\ 0 & & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

3 化下列矩阵为对称三对角阵：

$$A=\begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

4* 设A为任意n阶实对称阵，C_r为A的r阶主子矩阵，$r=1,\ 2,\ \cdots,\ n$。记

$\varphi_r(\lambda)=|C_r-\lambda I_r|$ （I_r为r阶单位阵）

如$\varphi_0(\lambda)=1$，$\varphi_1(\lambda)$，…，$\varphi_n(\lambda)$为A的施特姆序列，试问此序列与A的三对角化阵的施特姆序列是否相同？

5 设n阶阵A的任一特征值，至少满足下列不等式之一：

$|\lambda-a_{ii}|\leqslant R_i$

其中

$$R_i=\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n}|a_{ij}|,\ i=1,\ 2,\ \cdots,\ n$$

由此关于A的全部特征值可得出什么结论呢？

6 设n阶对称阵A与n阶对称三对角阵B相似：

$H^{-1}AH=B$

x为B的特征向量，则A的特征向量$y=Hx$。

§13 QR 方 法

在这节中将介绍求实矩阵的全部特征值的QR方法。这是

一种迭代法。它的基本思想是经过无限次正交相似变换将A化为上三角阵，其对角元即A的特征值。它的理论基于下面的定理1．

定理1　对任一n阶实矩阵A，都存在正交消元阵Q^{-1}，使A化为上三角阵R：

$$Q^{-1}A=R \tag{13.1}$$

或者说使A分解为正交阵与上三角阵之积，

$$A=QR \tag{13.1$_1$}$$

此种QR分解可以用第三章§12讲的初等反射矩阵来实现，只不过是每次将对角元以下元素全化为0。

（一）QR法的计算过程

由（13.1）或（13.1）$_1$可得

$$Q^{-1}AQ=RQ$$

即A与RQ相似，也就是QR与RQ正交相似，这就是导出QR法的出发点。记

$$A_1=A=Q_1R_1$$

令

$$A_2=R_1Q_1$$

显然

$$A_2=Q_1^{-1}A_1Q_1$$

再分解A_2为（13.1）$_1$式：

$$A_2=Q_2R_2$$

令

$$A_3=R_2Q_2$$

显然有

$$A_3=Q_2^{-1}Q_1^{-1}A_1Q_1Q_2$$

一般地有

$$A_k=Q_kR_k \tag{13.2}$$

$$A_{k+1} = R_k Q_k \tag{13.3}$$

并且有

$$A_{k+1} = Q_k^{-1} A_k Q_k \tag{13.4}$$

显然这是一种正交相似变换，可以证明，在一定条件下，当 $k \to \infty$ 时，A_k 收敛于一个上三角阵，其对角元为 A 的特征值。这就是求 A 的全部特征值的 QR 方法。

例 用 QR 法求

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 5 \end{pmatrix}$$

的特征值。

解 求 Q_1 使

$$Q_1 A = R_1$$

取

$$b_1 = (3,\ 4)^T$$

$$b_2 = (c_1,\ 0)^T$$

$$\sigma_1 = \sqrt{3^2 + 4^2} = 5$$

$$b_1 - b_2 = (a_{11} + \text{sgn}(a_{11})\sigma_1,\ a_{12})^T$$

$$= (3 + 5,\ 4)^T$$

$$\|b_1 - b_2\|_2 = \sqrt{2(\sigma_1^2 + |a_{11}|\sigma_1)}$$

$$= \sqrt{2(25 + 3 \times 5)} = 4\sqrt{5}$$

$$u = \frac{1}{4\sqrt{5}} (8,\ 4)^T$$

于是

$$Q_1 = I - 2uu^T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{2}{80}\begin{pmatrix} 8 \\ 4 \end{pmatrix}(8,\ 4)$$

$$= \begin{pmatrix} -\frac{3}{5} & -\frac{4}{5} \\ -\frac{4}{5} & \frac{3}{5} \end{pmatrix}$$

$$Q_1 A = \begin{pmatrix} -\frac{3}{5} & -\frac{4}{5} \\ -\frac{4}{5} & \frac{3}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -5 & -\frac{26}{5} \\ 0 & \frac{7}{5} \end{pmatrix} = \boldsymbol{R}_1$$

$$\boldsymbol{A}_2 = \boldsymbol{R}_1 Q_1 = \begin{pmatrix} -5 & -\frac{26}{5} \\ 0 & \frac{7}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{3}{5} & -\frac{4}{5} \\ -\frac{4}{5} & \frac{3}{5} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7.16 & 0.88 \\ -1.12 & 0.84 \end{pmatrix}$$

然后求 Q_2，使

$$Q_2 \boldsymbol{A}_2 = \boldsymbol{R}_2$$

计算

$$\boldsymbol{A}_3 = \boldsymbol{R}_2 Q_2$$

得

$$\boldsymbol{A}_3 = \begin{pmatrix} 7.046 & 1.954 \\ 0.150 & 0.954 \end{pmatrix}$$

继续下去，不难求得

$$\lambda_1 = 7, \quad \lambda_2 = 1$$

（二）QR 分解和序列 $\{A_k\}$ 的性质

引理 1　序列$\{A_k\}$有下列性质：

（1）$\boldsymbol{A}_{k+1}$ 与 $\boldsymbol{A}_1$正交相似，

$$\boldsymbol{A}_{k+1} = \overline{Q_k}^{-1} \boldsymbol{A}_1 \overline{Q_k} \qquad (13.4)_1$$

其中　$\overline{Q_k} = Q_1 Q_2 \cdots Q_k$。

（2）$\boldsymbol{A}_1^k$ 的 QR 分解为

$$\boldsymbol{A}_1^k = \overline{Q}_k \overline{\boldsymbol{R}}_k \qquad (13.5)$$

其中　$\overline{\boldsymbol{R}}_k = \boldsymbol{R}_k \boldsymbol{R}_{k-1} \cdots \boldsymbol{R}_1$。

证明（1）由 (13.2)，(13.3) 得：

$$
\begin{aligned}
A_{k+1} &= Q_k^{-1} A_k Q_k \\
&= Q_k^{-1} Q_{k-1}^{-1} A_{k-1} Q_{k-1} Q_k \\
&= \cdots\cdots\cdots = \\
& Q_k^{-1} Q_{k-1}^{-1} \cdots Q_1^{-1} A_1 Q_1 \cdots Q_{k-1} Q_k
\end{aligned}
$$

（2）由于

$$
\begin{aligned}
\overline{Q}_k \overline{R}_k &= Q_1 Q_2 \cdots Q_k R_k \cdots R_2 R_1 \\
&= Q_1 \cdots Q_{k-1} A_k R_{k-1} \cdots R_1 \\
&= \overline{Q}_{k-1} A_k \overline{R}_{k-1}
\end{aligned}
$$

由(13.4) $\overline{Q}_{k-1} A_k = A_1 \overline{Q}_{k-1}$

所以

$$
\begin{aligned}
\overline{Q}_k \overline{R}_k &= A_1 \overline{Q}_{k-1} \overline{R}_{k-1} \\
&= A_1^2 \overline{Q}_{k-2} \overline{R}_{k-2} \\
&= \cdots\cdots\cdots = \\
&= A_1^{k-1} \overline{Q}_1 \overline{R}_1 = A_1^k
\end{aligned}
$$
证完。

引理 2 如果非奇异阵A的 QR 分解除（13.1）外，还有

$$A = Q_1 R_1 \tag{13.6}$$

则必有

$$Q_1 = QE, \quad R_1 = ER \tag{13.7}$$

其中E为对角阵

$$E = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & & 0 \\ & \varepsilon_2 & \\ & & \ddots \\ 0 & & & \varepsilon_n \end{pmatrix} \tag{13.8}$$

而ε_i为＋1或－1。

证明 由(13.1)、(13.6)得

$$Q_1 R_1 = QR$$

$$Q^{-1} Q_1 = R R_1^{-1} \tag{13.8$_1$}$$

令

$$\widetilde{Q} = Q^{-1} Q_1, \quad \widetilde{R} = R R_1^{-1}$$

因$\widetilde{R}$为上三角阵，故$\widetilde{Q}$的对角线下面的元素必等于0。由$\widetilde{Q}$为

正交阵，则有

$$\widetilde{Q}^T = \widetilde{Q}^{-1}$$

由（13.8），知

$$\widetilde{Q}^{-1} = \widetilde{R}^{-1}$$

所以

$$\widetilde{Q}^T = \widetilde{R}^{-1}$$

所以$\widetilde{Q}$ 的右上非对角元素也必＝0，从而$\widetilde{Q}$为对角阵．因而有

$$\widetilde{Q} = \widetilde{Q}^T = \widetilde{Q}^{-1}$$

满足这种条件的正交阵的对角元ε_i的绝对值必等于1，记

$$\widetilde{Q} = E = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & & & 0 \\ & \varepsilon_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \varepsilon_n \end{pmatrix}$$

由于

$$\widetilde{R} = \widetilde{Q}$$

所以

$$\widetilde{R} = E$$

因为 $E^{-1} = E$，从而便得(13.7)、 证完。

由(13.7)知 Q_1 与 Q，R_1 与 R 只是其列（行）向量差个符号。

特别当要求R的对角元＞0时，则 $E = I$（单位矩阵），这时 $Q_1 = Q$，$R_1 = R$，即分解（13.1）$_1$ 唯一确定．

引理 3 设矩阵$x_k = I + F_k = Q_k R_k$，Q_k为正交阵，R_k为对角元素＞0 的上三角阵．则当 $F_k \to 0$ ($k \to \infty$)时，$Q_k \to I$，$R_k \to I$ ($k \to \infty$)。

证明 因 $F_k \to 0$，则有

$$Q_k R_k \to I$$

若设 $R_k \to R_0$ ($k \to \infty$)，则必有

$$Q_k \to R_0^{-1} \quad (k \to \infty)$$

今证 $R_0 = I$。设 $Q_k = (q_{ij}^{(k)})$．因 R_0^{-1}为上三角阵，故当 $i > j$ 时，

$$q_{ij}^{(k)} \to 0 \ (k\to\infty)$$

又因

$$Q_k^{-1} = Q_k^T$$

所以

$$Q_k^T \to R_0$$

所以当 $i<j$ 时，

$$q_{ij}^{(k)} \to 0 \ \ (k\to\infty)$$

所以 Q_k 收敛于对角阵，即 R_0^{-1}为对角阵。

因为Q_k与$Q_k^{-1}=Q_k^T$的对角元相同，故其极限R_0^{-1}与R_0的对角元相等。又因 R_k 的元素大于 0，所以R_0的对角元也必大于0，从而 R_0必为单位阵。证完。

定理 2 设阵 $A_1 = XDX^{-1}$。其中

$$D = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ \lambda_2, \ \cdots, \ \lambda_n)$$

如果（1）$|\lambda_1|>|\lambda_2|>\cdots|\lambda_n|>0$，

（2）$X^{-1}=LR$，

其中L为单位下三角阵，R 为上三角阵，则存在(13.8)型对角阵 E_1，E_2，…，使得

$$E_k A_{k+1} E_k \to R_x D R_x^{-1} \ \ (k\to\infty)$$

其中 $R_x = Q_x^{-1}X$为 上三角阵。

证明 由题设可知

$$A_1^k = XD^kX^{-1} = Q_xR_xD^kLR$$
$$= Q_xR_x(D^kLD^{-k})D^kR$$

设L的元素为l_{ij}，$D^kLD^{-k}=I+F_k$，F_k的元素为

$$(F_k)_{ij} = l_{ij}\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_j}\right)^k (i>j), \ (F_k)_{ij}=0 \ \ (i\leqslant j)$$

因为

$$\left|\frac{\lambda_i}{\lambda_j}\right|<1 \quad (i<j)$$

所以

$$(F_k)_{ij} \to 0 \quad (k\to\infty),\ \text{即}\ F_k \to 0 \quad (k\to\infty)$$

所以

$$A_1^{(k)} = Q_x(I + R_x F_k R_x^{-1}) R_x D^k R$$

设 $I + R_x F_k R_x^{-1} = Q_x^{(k)} R_x^{(k)}$，$R_x^{(k)}$ 的对角元大于0。因为

$$R_x F_k R_x^{-1} \to 0 \quad (k\to\infty)$$

故

$$Q_x^{(k)} \to I,\ R_x^{(k)} \to I$$

所以

$$A_1^k = Q_x Q_x^{(k)} R_x^{(k)} R_x D^k R \tag{13.9}$$

这是 A_1^k 的一个 QR 分解式。但另一方面，由引理1知(13.5)成立，比较(13.5)与(13.9)及引理2得

$$\overline{Q}_k = Q_x Q_x^{(k)} E_k,\ \overline{R}_k = R_x^{(k)} R_x D^k R E_k$$

从而由(13.4)，

$$A_{k+1} = \overline{Q}_k^{-1} A_1 \overline{Q}_k = E_k (Q_x^{(k)})^{-1} Q_x^{-1} A_1 Q_x Q_x^{(k)} E_k$$

所以

$$E_k A_{k+1} E_k = (Q_x^{(k)})^{-1} Q_x^{-1} X D X^{-1} Q_x Q_x^{(k)}$$

但

$$(Q_x^{(k)})^{-1} Q_x^{-1} X \to Q_x^{-1} X = R_x \quad (k\to\infty)$$

$$X^{-1} Q_x Q_x^{(k)} \to X^{-1} Q_x = R_x^{-1} \quad (k\to\infty)$$

所以 $$E_k A_{k+1} E_k \to R_x D R_x^{-1} \quad (k\to\infty) \tag{13.10}$$

$R_x D R_x^{-1}$ 为上三角阵，其对角元为 A_1 的特征值．证完．

注意，A_{k+1} 与 $E_k A_{k+1} E_k$ 的对角元相同．

习 题 3.13

1 将阵

$$A = \begin{pmatrix} 12 & -20 & 41 \\ 9 & -15 & -63 \\ 20 & 50 & 35 \end{pmatrix}$$

的 QR 分解式写出来，并作出 $A_2=RQ$。

2　写出矩阵

$$
A=\begin{pmatrix} -2 & 1 & & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \\ & 1 & -2 & 1 \\ 0 & & 1 & -2 \end{pmatrix}
$$

的 QR 分解式。设，

3　设 $\boldsymbol{A}_k=\boldsymbol{L}_k\boldsymbol{R}_k\to\boldsymbol{I}$ $(k\to\infty)$，求证 $\boldsymbol{L}_k\to\boldsymbol{I}$，$\boldsymbol{R}_k\to\boldsymbol{I}$，其中 $\boldsymbol{L}_k$ 为单位下三角阵，$\boldsymbol{R}_k$ 为上三角阵。

4　设 A_1 非奇异，如果

$$\boldsymbol{A}_1=\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{R}_1,\quad \boldsymbol{A}_k=\boldsymbol{L}_k\boldsymbol{R}_k,\quad \boldsymbol{A}_{k+1}=R_kL_k$$

求证

$$\boldsymbol{A}_1^k=\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{L}_2\cdots\boldsymbol{L}_k\boldsymbol{R}_k\cdots\boldsymbol{R}_2\boldsymbol{R}_1$$

$$\boldsymbol{A}_{k+1}=(\boldsymbol{L}_1\cdots\boldsymbol{L}_k)^{-1}\boldsymbol{A}_1(\boldsymbol{L}_1\cdots\boldsymbol{L}_k)$$

其中 $\boldsymbol{L}_k$ 为单位下三角阵，$\boldsymbol{R}_k$ 为上三角阵。

5　证明定理 1。

第四章　插值与逼近

§1　引　　言

在生产与科学实验中，反映自然规律的函数关系，往往是通过实验、观察得到的某个区间$[a,b]$上一组自变量为x_i的函数值$f(x_i)$，$i=0,1,2\cdots$，或者说是给出一张函数表：

x	x_0	x_1	……	x_n
y	y_0	y_1	……	y_n

$$y_i=f(x_i)$$

其函数的解析式是未知的；有时，尽管有解析式，但很复杂，也不便于使用。因此，有必要构造一个简单的近似函数$y(x)$来替代原来函数$f(x)$。一般地，称此理论为函数构造论，或简称逼近论。称$y(x)$为逼近函数，而称$f(x)$为被逼近函数。其差记为

$$R(x)=f(x)-y(x)$$

称为$y(x)$逼近$f(x)$的误差或余项。

由于对逼近误差的要求不同，便产生了各种不同的逼近方式。

本章主要介绍两种逼近方式：插值逼近与平方逼近。

所谓插值逼近：即要求逼近函数$y(x)$与被逼近函数$f(x)$，在区间$[a,b]$上的一些已知点x_i处误差

$$R(x_i)=f(x_i)-y(x_i)=0\ (i=0,1,2,\cdots,n)\text{ 即 }f(x_i)=y(x_i).$$

有时还要求在若干点上误差的若干阶导数值也等于零。把这种逼近方式，称为插值逼近。其几何解释如图4.1。

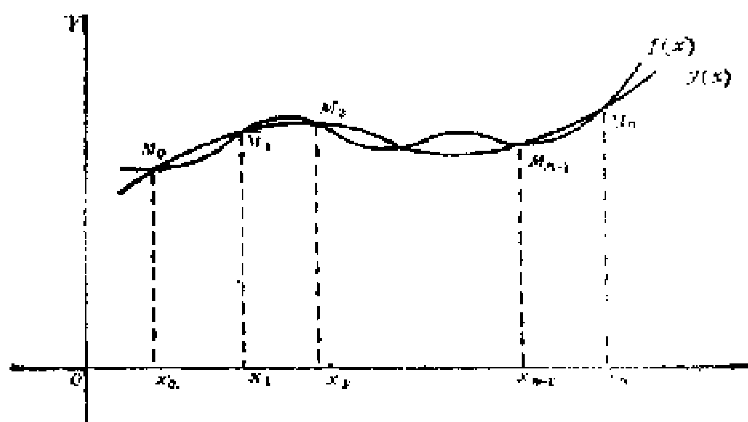


图 4.1

当$y(x)$为代数多项式时，称此插值逼近为代数内插法．称$y(x)$为插值多项式．

所谓**平方逼近**：即要求误差$R(x)$的平方在$[a,b]$上为

$$\min\int_a^b [R(x)]^2dx \text{ 或 } \min\sum_{i=0}^{n}[R(x_i)]^2$$

称此逼近方式为最小平方逼近或最小二乘法，简称平方逼近．因为代数多项式比较简单，所以常用它作为逼近函数．

本章对每一种逼近方式，将要讨论以下几个问题：

1　如何构造逼近函数$y(x)$，其基本思想是什么；

2　$y(x)$是否唯一；

3　如何估计逼近程度；

4　有何具体应用．

由于平方逼近的需要，我们还介绍了正交多项式的概念及其性质．

§2　线性插值与抛物插值

本节研究多项式插值中最简单的两种情况：线性插值与抛物插值．

(一) 线 性 插 值

1 **定义** 设函数$y=f(x)$在给定的互异节点 x_0，x_1 上 的函数为$y_0=f(x_0)$，$y_1=f(x_1)$，求一个不超过一次的多项式

$$y(x)=a_1x+a_0$$

使它满足条件

$$y(x_0)=y_0,\qquad y(x_1)=y_1 \tag{2.0}$$

称这种插值为**线性插值**。

显然，它是满足插值逼近定义的，即

$$R(x_i)=0,\ i=0,\ 1$$

2 线性插值的确定及其主要形式

由插值的几何意义知，线性插值的几何意义，是求过在曲线$f(x)$上已知点 $A(x_0,\ y_0)$，$B(x_1,y_1)$的直线方程。如图4.2。

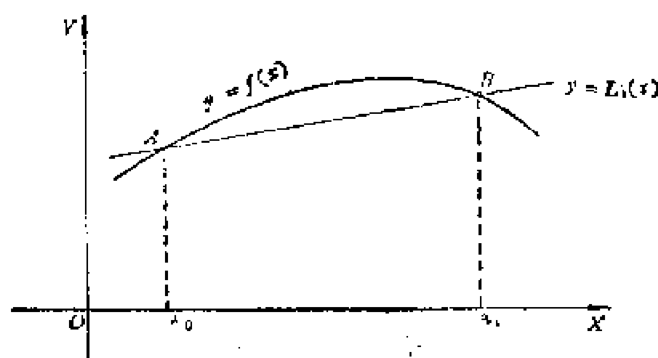


图4.2

我们熟知，过 AB 的直线方程可以写成

$$y(x)=y_0+\frac{y_1-y_0}{x_1-x_0}(x-x_0) \tag{2.1}$$

而上式中的比值$\frac{y_1-y_0}{x_1-x_0}$，仅与点A、B的坐标有关，与变量x无关，故可记作$f(x_0,x_1)$，即

$$f(x_0,x_1)=\frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}$$

于是(2.1)可改写为

$$y(x)=f(x_0)+f(x_0,x_1)(x-x_0) \qquad (2.1)_1$$

不难看出，(2.1)式还可改写为

$$y(x)=\frac{x-x_1}{x_0-x_1}y_0+\frac{x-x_0}{x_1-x_0}y_1 \qquad (2.2)$$

把(2.1)、$(2.1)_1$与(2.2)都称为$f(x)$在x_0，x_1上的**线性插值函数**，简称**线性插值**。而把(2.1)或$(2.1)_1$称为线性插值的**牛顿形式**，简称**牛顿线性插值多项式**，记为$f_1(x)$，即

$$f_1(x)=f(x_0)+f(x_0,x_1)(x-x_0) \qquad (2.1)_2$$

把(2,2)又称为线性插值的**拉格朗日形式**，简称**拉格朗日线性插值多项式**，记为$L_1(x)$，即

$$L_1(x)=\frac{x-x_1}{x_0-x_1}y_0+\frac{x-x_0}{x_1-x_0}y_1 \qquad (2.2)_1$$

显然，$f_1(x)=L_1(x)$，且都满足条件(2.0)，即

$$f_1(x_i)=L_1(x_i)=y_i,\quad i=0,\ 1$$

又因过两点A，B仅能作一条直线，所以$y(x)$是唯一的。线性插值余项为

$$R_1(x)=f(x)-L_1(x)=f(x)-f_1(x)$$

其具体估计在下节给出。

3 计算实例

例 1 已知$y=f(x)$的函数表

x	1	3
y	1	2

求其近似插值表达式。

解 因为这是已知两点，求其近似表达式的问题，所以可按线性插值求之。为此将已知函数表的值代入$(2.2)_1$中，得

$$L_1(x)=\frac{x-3}{1-3}\times 1+\frac{x-1}{3-1}\times 2$$

$$=\frac{1}{2}(x+1)$$

故 $f(x) \doteq \frac{1}{2}(x+1)$.

4 线性插值的应用——造“数学用表”中的修正项.

例如，求lg2.718的值，我们熟知，用“数学用表” 的常用对数表，先查出

$$\lg 2.71 = 0.4330$$

再查出对应的修正项为0.0013，然后计算出

$$\lg 2.718 = 0.4330 + 0.0013 = 0.4343$$

现将常用对数表摘录如下：

N	0	1	2	……	9	1	2	……	8	9
10										
11										
⋮										
27	4330	4346							13	
28										

其中修正项0.0013是怎么算出来的？又为什么先查前三位的对数，然后加上修正项就是所求四位的对数呢？这就是线性插值的具体应用.

事实上，设$x_1 - x_0 = h$，$x = x_0 + th$，则

$$t = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}$$

再令，$\Delta y_0 = y_1 - y_0$，则(2.1)式可写为

$$y(x_0 + th) = y_0 + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}(y_1 - y_0)$$

$$= y_0 + t\Delta y_0 \qquad (2.1)$$

于是把$y(x_0 + th)$看作所要求的函数值，它就等于x_0处的函数值y_0加上所谓修正项$t\Delta y_0$.

因此，要计算 lg2.718，就取 $x_0 = 2.71$，$x_2 = 2.72$，

$x=2.718$，则 $h=0.01$，$t=0.80$，$y_0=\lg 2.71=0.4330$，$\Delta y_0=0.0016$，则得修正项为

$$t\Delta y_0=0.0013=13\times10^{-4}$$

于是在“数学用表”中，先列出三位数的对数值，再把相应于 t 的修正项$t\Delta y_0$算出来，列在表的旁边，便可求出四位数的对数。

（二）抛 物 插 值

线性插值，虽然计算方便，应用很广，但由于它是用直线去代替曲线，因而一般要求插值区间$[x_0,x_1]$比较小，且$f(x)$在$[x_0,x_1]$上变化比较平稳。否则，线性插值的误差可能很大。见图4.3，图4.4。

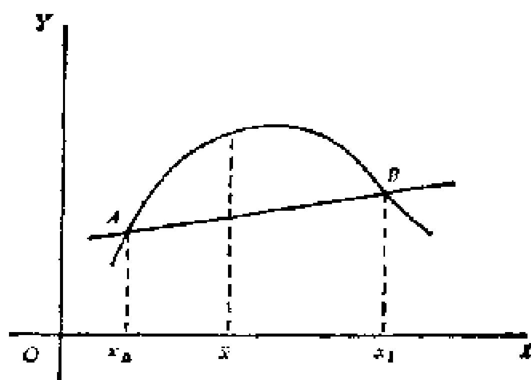


图 4.3

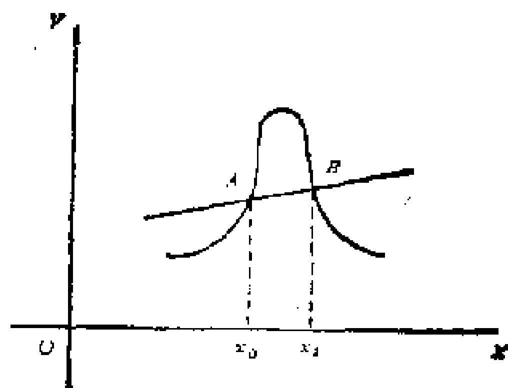


图 4.4

为克服这一缺点，我们用简单的曲线去近似地代替复杂的曲线，而抛物线是最简单的二次曲线之一。下面就来研究用抛物线去逼近已知曲线$f(x)$的情形。

1　**定义**　设$y=f(x)$在给定互异的节点x_0，x_1，x_2上对应的函数值分别为y_0，y_1，y_2，其中$y_i=f(x_i)$，求一个不超过二次的多项式

$$y(x)=a_2x^2+a_1x+a_0$$

使之满足条件

$$y(x_i)=y_i,\quad i=0,\ 1,\ 2$$

称这种插值为抛物插值．见图4.5。

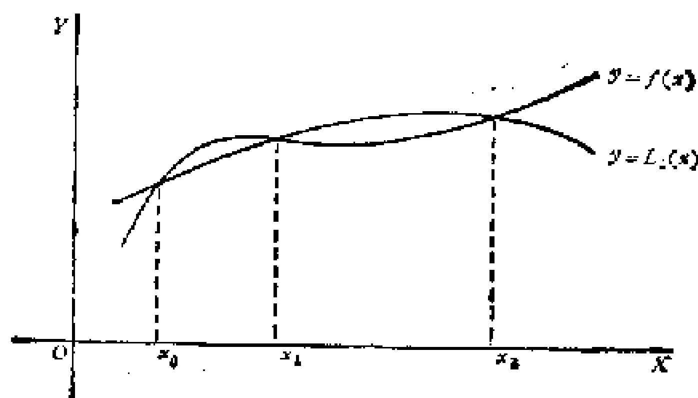


图　4.5

2　抛物插值的确定及其主要形式

首先，我们注意，(2.2)它可改写为

$$L_1(x)=l_0(x-x_1)+l_1(x-x_0) \qquad (2.3)$$

其中

$$l_0=\frac{y_0}{x_0-x_1},\quad l_1=\frac{y_1}{x_1-x_0}$$

由上式看出，一次插值多项式是由两个一次式的线性组合构成的．为此，对二次插值多项式，可以设由三个二次式的线性组合构成的．即

$$L_2(x)=l_0(x-x_1)(x-x_2)+l_1(x-x_0)(x-x_2)$$
$$+l_2(x-x_0)(x-x_1) \qquad (2.4)$$

其中，l_0，l_1，l_2为待定常数。

由于$L_2(x_0)=y_0$，令$x=x_0$，代入(2.4)得

$$l_0=\frac{y_0}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}$$

同理由插值条件，$L_2(x_1)=y_1$，$L_2(x_2)=y_2$，可分别求得

$$l_1=\frac{y_1}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)},\quad l_2=\frac{y_2}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

将其代入(2.4)，简单整理后，就得到所求的二次插值多项式：

$$L_2(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}\times y_0+\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}\times y_1+\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}\times y_2 \qquad (2.5)$$

此形式又称为二次拉格朗日插值多项式.

当然，抛物插值也有其牛顿表示形式，我们以后再介绍它.

3　应用实例

例 2　已知函数$f(x)$的函数表

x	1	3	2
y	1	2	−1

求$f(x)$的抛物插值多项式，并计算$f(1.5)$的近似值.

解　因为是三个不同节点，所以可作抛物插值. 即将函数表的数据代入(2.5) 得

$$L_2(x)=\frac{(x-3)(x-2)}{(1-3)(1-2)}\times 1+\frac{(x-1)(x-2)}{(3-1)(3-2)}\times 2+\frac{(x-1)(x-3)}{(2-1)(2-3)}\times(-1)$$

$$=\frac{1}{2}(x-3)(x-2)+(x-1)(x-2)+(x-1)(x-3)$$

$$=\frac{1}{2}(5x^2-19x+16)$$

令 $x=\frac{3}{2}$　代入上式计算得

$$L_2\left(\frac{3}{2}\right)=\frac{1}{2}\left[5\times\left(\frac{3}{2}\right)^2-19\left(\frac{3}{2}\right)+16\right]=-0.625$$

故

$$f(1.5) \doteq -0.625$$

§3 拉格朗日(Lagrange)插值公式

本节给出n次插值多项式的定义、唯一性的证明、估计出余项，并给出拉格朗日形式的公式。

(一) n 次代数插值的定义

设函数$y=f(x)$在$[a,b]$上有$n+1$个互不相同节点x_0, x_1, x_2, …, x_n及其相对应的函数值为y_0, y_1, y_2, …y_n，其中$y_i=f(x_i)$。试构造一个次数不超过n的代数多项式

$$y(x)=a_n x^n+a_{n-1}x^{n-1}+\cdots+a_0 \tag{3.1}$$

使之满足条件

$$y(x_i)=y_i,\quad i=0,1,2\cdots,n \tag{3.2}$$

则称此问题为n次代数插值逼近，简称n次插值．把$y(x)$称为$f(x)$在$n+1$个互不相同节点x_i上的插值多项式．或者说，求过$n+1$个不同点

$$M(x_0,y_0),M(x_1,y_1),\cdots,M(x_n,y_n)$$

的n次代数曲线$y(x)$的表达式。其中点M_i是在曲线$y=f(x)$上取的。称(3.2)为插值条件。

(二) 唯 一 性

对n次代数插值来说，只要在$n+1$个不同节点上满足插值条件(3.2)，所作的插值多项式$y(x)$是唯一的。

事实上，如果存在两个n次多项式$y(x)$、$g(x)$且$y(x)\neq g(x)$，但都满足插值条件(3.2)即

$$y(x_i)=g(x_i)=y_i,\quad i=0,1,2,\cdots,n$$

则它们的差$S(x)=g(x)-y(x)$是次数小于或等于n的多项式，又

从条件(3.2)得

$$S(x_i)=g(x_i)-y(x_i)=0, \quad i=0,1,2,\cdots,n$$

于是知$S(x)$有$n+1$个不同的零点。这只有在$S(x)\equiv 0$才可能，因而得$g(x)=y(x)$与假设矛盾，故证完。

(三) 代数插值余项及其估计式

我们把差$f(x)-y(x)$称为用插值多项式$y(x)$代替$f(x)$的余项、误差、或插值余项，记为

$$R_n(f,x)=f(x)-y(x)$$

如果$f(x)$在$[a,b]$上存在$n+1$阶导数，则有

$$R_n(f,x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x). \qquad (3.3)$$

其中

$$\omega(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n) \qquad (3.4)$$

$$a<\xi<b$$

事实上，由条件(3.2)得

$R_n(f,x_i)=f(x_i)-y(x_i)=0$，$i=0,1,2,\cdots,n$，从而可知，$R_n(f,x)$含有因式$\omega(x)$。于是设余项为

$$R_n(f,x)=k(x)\omega(x) \qquad (3.3)_1$$

如果能确定出$k(x)$，问题就解决了。为此，引入辅助函数

$$g(z)=f(z)-y(z)-k(x)\omega(z)$$

则x_0，x_1，$\cdots$，x_n及x均为$g(z)$的零点，共有$n+2$个。如果将x_0，x_1，$\cdots x_n$，x按大小顺序排列，应用罗尔定理，则在$[a,b]$上$g'(z)$至少有$n+1$个零点。$g''(z)$至少有n个零点，……，$g^{(n+1)}(z)$至少有一个零点，设此零点为ξ，则有

$$g^{(n+1)}(\xi)=f^{(n+1)}(\xi)-k(x)(n+1)!=0$$

从上式解得

$$k(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$$

其中 ξ 与 x_0，$x_1, \cdots$，x_n 及 x 是有关的，且 $a<\xi<b$。将 $k(x)$ 代入(3.3)$_1$，得到(3.3)。

若 $|f^{(n+1)}(x)| \leqslant M_{n+1}$，$x \in [a,b]$，则余项估计式

$$|R_n(f,x)| \leqslant \frac{M_{n+1}}{(n+1)!}|\omega(x)| \tag{3.5}$$

例　求线性插值余项及其估计式。

解　由(3.3)，当 $n=1$ 得线性插值余项为

$$R_1(f,x) = \frac{f^2(\xi)}{2!}\omega(x)$$

其中 $\omega(x)=(x-x_0)(x-x_1)$，又因为

$$|x-x_0||x-x_1| \leqslant \frac{1}{4}(x_1-x_0)^2$$

所以

$$|R_1(f,x)| \leqslant \frac{|f^{(2)}(\xi)|}{2!}|x-x_0||x-x_1| \leqslant \frac{M_2}{8}(x_1-x_0)^2 \tag{3.5$_1$}$$

其中　$M_2 = \max\limits_{a \leqslant x \leqslant b} |f''(x)|$

（四）n 次拉格朗日插值多项式

由公式(2.3)知线性插值是由二个一次式的线性组合构成的，由公式(2.4)知抛物插值是由三个二次式的线性组合构成的。

由此启发，n 次代数插值可由 $n+1$ 个 n 次式的线性组合而构成的。即

$$\begin{aligned} L_n(x) = {} & l_0(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n)+ \\ & +l_1(x-x_0)(x-x_2)\cdots(x-x_n)+\cdots+ \\ & +l_i(x-x_0)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)+ \\ & +\cdots+ \\ & +l_n(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1}) \end{aligned}$$

其中 l_0，l_1，l_2，$\cdots$，l_n 为待定常数，求法如下：

令 $x=x_i$ 代入上式，由条件(3.2)便有

$$L_n(x_i)=l_i(x_i-x_0)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)=y_i$$

从而得

$$l_i=\frac{y_i}{(x_i-x_0)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}=\frac{y_i}{\omega'(x_i)},\quad i=0,\ 1,\ 2,\ \cdots,n \tag{3.6}$$

其中

$$\omega'(x_i)=(x_i-x_0)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n) \tag{3.7}$$

代入(3.5)中，且缩写成和的形式得：

$$L_n(x)=\sum_{i=0}^{n}\frac{\omega(x)}{(x-x_i)\omega'(x_i)}y_i \tag{3.8}$$

或记成

$$L_n(x)=\sum_{i=0}^{n}l_i(x)y_i \tag{3.8$_1$}$$

其中

$$l_i(x)=\frac{\omega(x)}{(x-x_i)\omega'(x_i)}=\prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n}\left(\frac{x-x_k}{x_i-x_k}\right) \tag{3.9}$$

此处$\omega(x)$由(3.4)确定的，$\omega'(x_i)$由(3.7)确定的。

通常称(3.8)或(3.8)$_1$为$y=f(x)$在$x_0,x_1,\cdots,x_n$上的拉格朗日插值多项式，称$l_i(x)$为拉格朗日基本插值多项式。称l_i为拉格朗日多项式的插值系数。我们把$f(x)=L_n(x)+R_n(f,x)$称为拉格朗日插值公式。

当$n=1$时，即为线性插值(2.2)；

当$n=2$时，即为抛物插值(2.5)。

最后指出：公式(3.8)或(3.8)$_1$，只要求节点位置不同，而与它们的排列顺序无关。特别当节点按大小顺序排列，且相

邻两个节点之差为定值时，则会得到等距节点的拉格朗日公式，请读者自己练习推导（习题4.3第13题）。

（五）应用举例

我们知道，已知函数$f(x)$，求其在某区间$[a,b]$上的零点，可以用第二章中的方法解决。但是当函数解析式未知时，而仅知在$[a,b]$上的函数表，那么，如何求其在$[a,b]$上的零点呢？一般的，我们先求$f(x)$在$[a,b]$上的插值函数$y(x)$，然后求$y(x)$的零点，把此零点就作为$f(x)$的近似零点。

特别是，假设$f(x)$的反函数存在，记为

$$x=\varphi(y) \tag{3.10}$$

于是求$f(x)$的零点问题，就变成求函数值$\varphi(0)$的问题了。

比如，已知$f(x)$在$[a,b]$上的函数表

x	x_0	x_1	……	x_n
y	y_0	y_1	……	y_n

（3.11）

求其在$[a,b]$上的零点。如果当函数值按严格单调形式排列时，则我们就认为$f(x)$在$[a,b]$上存在反函数，且其反函数$\varphi(y)$的插值函数由函数表

y	y_0	y_1	……	y_n
x	x_0	x_1	……	x_n

（3.12）

构成的。于是，设$f(x)$的零点为x^*，则

$$x^*=\varphi(0)$$

其中$\varphi(0)$的近似值为由表(3.12)所作的插值多项式$\varphi_n(y)$即

$$\varphi_n(y)=\sum_{i=0}^{n}\left(\prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n}\left(\frac{y-y_k}{y_i-y_k}\right)\right)x_i \tag{3.13}$$

在$y=0$的值。

例 3 已知函数表

x	0	1	2
y	8	-7.5	-18

求$f(x)$在$[0,2]$之间的零点近似值。

解 因为，y_i是按严格单调下降排列，所以可用反插值法求其零点，为此，先把原表变成反函数表：

y	8	-7.5	-18
x	0	1	2

按上表且令$y=0$，代入(3,13)式，得

$$\varphi_2(0)=\frac{(0+7.5)(0+18)}{(8+7.5)(8+18)}\times 0+\frac{(0-8)(0+18)}{(-7.5-8)(-7.5+18)}\times 1+\frac{(0-8)(0+7.5)}{(-18-8)(-18+7.5)}\times 2$$

$$=\frac{8\times 18}{15.5\times 10.5}-\frac{8\times 7.5\times 2}{26\times 10.5}$$

$$\doteq 0.445$$

即 $x^*\doteq 0.445$

实际上，$f(x)=\left(x-\frac{1}{2}\right)(x+4)(x-4)$

$$=x^3-\frac{1}{2}x^2-16x+8$$

$f(x)$在$[0,2]$之间的零点为$x^*=0.5$。

习 题 4.3

1 已知函数表

x	3	4
y	0.5	0.64

求 $x=3.8$ 的函数值。

2 已知函数表

x	3	1	4
y	4	2	5

求 $L_2(x)$的表达式。

3 已知函数表

x	100	121	144
y	10	11	12

试不用开方的办法而用抛物插值法计算$\sqrt{115}$的值。

4 试说明《四位数学用表》中正弦和余弦表的修正项也是用线性插值构造的。

5 在$[0,\pi]$上取点$0,\frac{\pi}{2},\pi$作$\sin x$的抛物插值多项式$L_2(x)$，且描绘出$y=L_2(x)$的图形，同时描绘出$\sin x$的级数近似表达式$y=x$，及$y=x-\frac{x^3}{6}$的图形，说明抛物插值与级数近似各有何特点。

6 设$L_2(x)=l_0(x)y_0+l_1(x)y_1+l_2(x)y_2$。满足条件$L_2(x_0)=y_0,L_2(x_1)=y_1,L_2(x_2)=y_2$求二次式$l_0(x),l_1(x),l_2(x)$。

7 证明若拉格朗日插值多项式的首项系数记为$f(x_0,x_1,\cdots,x_n)$，则

$$f(x_0,x_1,\cdots,x_n)=\sum_{i=0}^{n}\frac{y_i}{\omega'(x_i)}=\sum_{i=0}^{n}l_i \qquad (3.14)$$

而且$f(x_0,x_1,\cdots,x_n)$关于$x_0,x_1,\cdots,x_n$是对称的。

8 证明 $\sum_{i=0}^{n}l_i(x)=1$。

9　证明任何 n 次多项式，都可以改写成为拉格朗日插值多项式的形式。

10　设$y=x$,求 y 在节点$0,1,2,\cdots,n$上的拉格朗日插值多项式。

11　已知连续函数$p(x)$的函数值表如下：

x	-1	0	1	2
$p(x)$	-2	-1	1	2

求方程$p(x)=0$在$[-1,2]$内的近似根。

12　某农业科学研究所，于某年做的大豆密度与花荚脱落关系的实验，得下列数据：

密　度	开花数	结荚数	脱落数	产　量	
万株/公顷	m^2	m^2	%	公斤/公顷	%
20	1221	—	—	1864.5	100
25	1133	394	75.2	2045.5	109.7
30	1601	360	77.5	2064.0	110.7
35	1225	321	73.8	1638.0	87.9

用线性插值法计算密度为32万株/公顷时的开花数，结荚数、脱落率。

13　试推等距拉格朗日插值多项式。

提示：设$x_{i+1}-x_i=h$,　$x=x_0+th$。

§4　牛顿基本插值公式

拉格朗日插值多项式，虽然有一定规律，但是每当增加一个节点时，不仅要增加项数，而且以前各项也必须全部重新计算，不能利用已有的结果．为克服这一缺点，本节介绍它的另

一种形式：牛顿基本插值多项式。

（一）牛顿基本插值多项式

为了讨论牛顿基本插值多项式，首先讨论n－1次与n次拉格朗日插值多项式的差别与联系。

设$L_{n-1}(x)$是通过n个不同点 (x_0,y_0)，(x_1,y_1)，……，(x_{n-1},y_{n-1})的小于或等于$n-1$次插值多项式。即

$$L_{n-1}(x_i)=y_i, \quad i=0,1,2,\cdots,n-1$$

又设$L_n(x)$是不仅通过上述n个不同点(x_0,y_0),(x_1,y_1),$\cdots$,(x_{n-1},y_{n-1})，而且还通过另外一点(x_n,y_n)的小于或等于n次插值多项式。或者说

$$L_n(x_i)=L_{n-1}(x_i)=y_i, i=0,1,2,\cdots,n-1 \qquad (4.0)$$

$$L_n(x_i)=y_n$$

由条件(4.0)知

$$L_n(x_i)-L_{n-1}(x_i)=0, \quad i=0,1,2,\cdots,n-1$$

于是可设

$$L_n(x)-L_{n-1}(x)=a_n(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})$$

其中a_n为待定系数，或改写为

$$L_n(x)=L_{n-1}(x)+a_n(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1}) \qquad (4.1)$$

为了确定a_n，只要注意上面等式两端都是n次多项式。当然，它们的首项系数必定相等，即由习题4.3第7题知

$$a_n=f(x_0,x_1,\cdots,x_n)$$

其中

$$f(x_0,x_1,\cdots,x_n)=\sum_{i=0}^{n}\frac{f(x_i)}{\omega'(x_i)}$$

于是，得关系式

$$L_n(x)=L_{n-1}(x)+$$
$$+f(x_0,x_1,\cdots,x_n)(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1}) \quad (4.1)_1$$

上式说明每增加一个条件，就在原插值多项式的基础上，仅需增加一项：

$$f(x_0,x_1,\cdots,x_n)(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1}) \qquad (4.2)$$

此项特点是 n 次式 $(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})$ 乘上一个相应常数 $f(x_0,x_1,\cdots,x_n)$ 之积。这样就给构造插值多项式带来很大方便。

现在应用上面结论，导出 $L_n(x)$ 的另一种表示形式：

对(4.1) 当 $n=0,1,2,\cdots,n$ 时有

$$L_0(x)=f(x_0)$$

$$L_1(x)=L_0(x)+f(x_0,x_1)(x-x_0)$$

$$L_2(x)=L_1(x)+f(x_0,x_1,x_2)(x-x_0)(x-x_1)$$

$$\cdots\cdots$$

$$L_n(x)=L_{n-1}(x)+$$
$$+f(x_0,x_1,\cdots,x_n)(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})$$

将上面 $n+1$ 个等式两端分别相加，则得

$$\begin{aligned}L_n(x)=&f(x_0)+f(x_0,x_1)(x-x_0)+\\&+f(x_0,x_1,x_2)(x-x_0)(x-x_1)+\cdots\\&+f(x_0,x_1,\cdots,x_n)(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})\end{aligned} \qquad (4.3)$$

上式称为 $f(x)$ 在条件(3.2)上的牛顿基本插值多项式，为了区别起见，将(4.3)记作 $f_n(x)$。显然，$f_n(x)=L_n(x)$。

在实际计算 $f_n(\bar{x})$ 时，为了节省运算次数，可将(4.3)变成如下形式，（以 $n=4$ 为例）

$$\begin{aligned}f_4(\bar{x})=\{[(f(x_0,x_1,x_2,x_3,x_4)(\bar{x}-x_3)&\\+f(x_0,x_1,x_2,x_3))(\bar{x}-x_2)+&\\+f(x_0,x_1,x_2)](\bar{x}-x_1)+&\\f(x_0,x_1)\}(\bar{x}-x_0)+f(x_0)&\end{aligned} \qquad (4.3)_1$$

从(4.3)式看出，求 $f_n(x)$ 主要是计算系数

$$f(x_0,x_1,x_2,\cdots,x_k),\quad k=1,2,\cdots,n$$

但是如按下式

$$f(x_0,x_1,\cdots,x_n)=\sum_{i=0}^{n}\frac{y_i}{\omega'(x_i)}$$

来计算是复杂的。为此，必须讨论系数$f(x_0,x_1,\cdots,x_n)$与函数值$f(x_i)$， $i=0,1,2,\cdots,n$ 之间关系，从而导出计算 $f(x_0,x_1,\cdots,x_n)$的方法. 为此令 $n=1,x=x_1$，代入(4,3)得

$$L_1(x_1)=f(x_0)+f(x_0,x_1)(x_1-x_0)=f(x_1)$$

即

$$f(x_0,x_1)=\frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}$$

把上式称为$f(x)$在x_0,x_1上的一阶差商。

一般地，$f(x)$在任意两个不同节点 x_i,x_j 的一阶差商，可定义为如下形式：

$$f(x_i,x_j)=\frac{f(x_j)-f(x_i)}{x_j-x_i},x_i\neq x_j \tag{4.4}$$

显然，$f(x_i,x_j)=f(x_j,x_i)$。

为了计算$f(x_0,x_1,x_2)$。令$n=2,x=x_2$，代入(4.3)，且注意插值条件$L_2(x_2)=f(x_2)$，得

$$\begin{aligned}L_2(x_2)=&f(x_0)+f(x_0,x_1)(x_2-x_0)\\&+f(x_0,x_1,x_2)(x_2-x_0)(x_2-x_1)\\=&f(x_2)\end{aligned}$$

于是从上式可求得

$$\begin{aligned}f(x_0,x_1,x_2)&=\frac{f(x_2)-f(x_0)-f(x_0,x_1)(x_2-x_0)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}\\&=\frac{\dfrac{f(x_2)-f(x_0)}{x_2-x_0}-f(x_0,x_1)}{x_2-x_1}\\&=\frac{f(x_0,x_2)-f(x_0,x_1)}{x_2-x_1}\end{aligned}$$

与一阶差商一样，称 $f(x_0,x_1,x_2)$为$f(x)$ 在节点x_0,x_1,x_2上的一阶差商的差商．简称为$f(x)$在x_0,x_1,x_2上的二阶差商。

由式(3.14)知，$f(x_0,x_1,x_2)$关于x_0,x_1,x_2是对称的。故它又可记成

$$f(x_0,x_1,x_2)=\frac{f(x_1,x_2)-f(x_0,x_1)}{x_2-x_0}$$

读者可以具体验证一下，此值确实不变。

同理，可定义：$f(x)$关于x_i,x_k,x_j的二阶差商为

$$f(x_i,x_j,x_k)=\frac{f(x_j,x_k)-f(x_i,x_j)}{x_k-x_i}\quad (x_k\neq x_i)\qquad (4.5)$$

这样继续下去，我们可以在$k-1$阶差商的基础上，定义K阶差商为如下形式：(*)

$$f(x_i,x_{i+1},\cdots,x_{i+k})$$

$$=\frac{f(x_{i+1},x_{i+2},\cdots,x_{i+k})-f(x_i,x_{i+1},\cdots,x_{i+k-1})}{x_{i+k}-x_i}$$

$$(x_{i+k}\neq x_i)\qquad (4.6)$$

于是，当$i=0$，$k=n$，时，有

$$f(x_0,x_1,\cdots,x_n)=\frac{f(x_1,x_2,\cdots,x_n)-f(x_0,x_1,\cdots,x_{n-1})}{x_n-x_0}$$

$$(4.6)_1$$

从而，(4.3)式的各阶差商可以用(4.6)式来计算。但在实际上计算各阶差商，往往是列表计算的，称此表为差商表。具体见下表：

x_i	$f(x_i)$	一阶差商	二阶差商	三阶差商
x_0	$f(x_0)$			
x_1	$f(x_1)$	$f(x_0,x_1)$		
x_2	$f(x_2)$	$f(x_1,x_2)$	$f(x_0,x_1,x_2)$	
x_3	$f(x_3)$	$f(x_2,x_3)$	$f(x_1,x_2,x_3)$	$f(x_0,x_1,x_2,x_3)$

---

* 注意下标之间的关系。

由上表可看出，公式(4.3)中的系数刚好位于表的上斜行中，故$f_n(x)$又叫差商插值多项式。

例 4　已知函数表

x	1	3	2
y	1	2	-1

求其差商插值多项式并计算$x=\frac{3}{2}$之函数值。

解　先计算差商

x	y	一阶差商	二阶差商
1	1		
3	2	$\frac{1}{2}$	
2	-1	3	$\frac{5}{2}$

此时，$n=2$，所以，类似$(4.3)_1$得

$$f_2(x)=\left\{\frac{5}{2}(x-3)+\frac{1}{2}\right\}(x-1)+1$$

$$=\frac{1}{2}(5x^2-19x+16)$$

而当 $x=\frac{3}{2}$时，代入上式计算得

$$f_2\left(\frac{3}{2}\right)=-0.625$$

注意在计算函数值 $f_2\left(\frac{3}{2}\right)$时，需要用加、减法的次数是10次，用乘除法的次数是 5 次；而用$L_2\left(\frac{3}{2}\right)$计算时，则用加、减法的次数是 8 次，用乘除法的次数是12次。一般地说，牛顿基本插值多项式要比拉格朗日插值多项式的计算工作量要少。

最后指出，以$f_n(x)$替代 $f(x)$所产生的余项为

$$R_n(f,x)=\omega(x)f(x_0,x_1,\cdots,x_n,x) \quad (4.7)$$

事实上，把x看成为不同于$x_0,x_1,\cdots,x_n$的节点，则以$x_0,x_1,\cdots,x_n,x$作差商插值多项式

$$f_{n+1}(Z)=f_n(Z)+\omega(Z)f(x_0,x_1,\cdots,x_n,x)$$

如令$Z=x$时，注意到$f_{n+1}(x)=f(x)$，则得牛顿插值公式

$$f(x)=f_n(x)+\omega(x)f(x_0,x_1,\cdots x_n,x)$$

从而便得(4.7)。

这是在不要求$f(x)$具有$n+1$阶导数存在的条件下的余项形式。

如果$f(x)$在$[a,b]$上存在$n+1$阶导数则有

$$f(x_0,x_1,\cdots,x_n,x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \quad (4.8)$$

事实上，只要注意到唯一性，比较(3.3)与(4.7)就得到(4.8)。

(4.8)也是差商的另一性质，即差商与导数的关系为

$$f(x_0,x_1,\cdots,x_n)=\frac{f^{(n)}(\xi_1)}{n!} \quad (4.9)$$

其中$\min\limits_{0\leqslant i\leqslant n}(x_i)<\xi_1<\max\limits_{0\leqslant i\leqslant n}(x_i)$

注意，一般把

$$f(x)=f_n(x)+R_n(f,x)$$

称为牛顿基本插值公式。

（二）等距——牛顿插值多项式

1　牛顿前插多项式

设$f(x)$在给定等距节点

$$x_0=a,\quad x_1=a+h,\cdots,\quad x_n=a+nh \quad (4.10)$$

上的值分别为

$$y_0,y_1,y_2,\cdots,y_n$$

其中$h>0$为相邻两节点的距离，称为步长。

我们考虑牛顿基本插值多项式的变形之前，先讨论等距节点时差商的变形。如一阶差商

$$f(x_i, x_{i+1}) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i}$$

$$= \frac{y_{i+1} - y_i}{h}$$

变成函数差$y_{i+1} - y_i$与步长h之商。由此，我们把差$y_{i+1} - y_i$称为函数$f(x)$在x_i上的一阶向前差分，简称一阶差分，记作

$$\Delta y_i = y_{i+1} - y_i$$

如　$\Delta y_0 = y_1 - y_0, \Delta y_1 = y_2 - y_1, \cdots, \Delta y_{i+1} = y_{i+2} - y_{i+1}$ 都是一阶差分，显然一阶差商与一阶差分有如下关系式

$$f(x_i, x_{i+1}) = \frac{\Delta y_i}{h}$$

同理$f(x)$关于相邻的x_i, x_{i+1}, x_{i+2}二阶差商可表示为：

$$f(x_i, x_{i+1}, x_{i+2}) = \frac{f(x_{i+1}, x_{i+2}) - f(x_i, x_{i+1})}{x_{i+2} - x_i}$$

$$= \frac{\Delta y_{i+1}/h - \Delta y_i/h}{2h}$$

$$= \frac{\Delta y_{i+1} - \Delta y_i}{2!h^2}$$

把上式中分子$\Delta y_{i+1} - \Delta y_i$称为$f(x)$在$x_i$点上的一阶差分的差分，简称为$f(x)$在点$x_i$上的二阶差分。记为

$$\Delta^2 y_i = \Delta y_{i+1} - \Delta y_i$$

于是有

$$f(x_i, x_{i+1}, x_{i+2}) = \frac{\Delta^2 y_i}{2!h^2}$$

如此下去，则可定义$f(x)$在x_i点上的K阶差分为

$$\Delta^k y_i = \Delta^{k-1} y_{i+1} - \Delta^{k-1} y_i \tag{4.11}$$

显然一般的差商与差分关系为

$$f(x_i, x_{i+1}, \cdots, x_{i+k}) = \frac{\Delta^k y_i}{k!h^k} \tag{4,12}$$

从而(4.3)式在条件(4.10)下变成

$$\begin{aligned} f_n(x) = y_0 &+ \frac{\Delta y_0}{h}(x - x_0) \\ &+ \frac{\Delta^2 y_0}{2!h^2}(x - x_0)(x - x_1) + \cdots \\ &+ \frac{\Delta^n y_0}{n!h^n}(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{n-1}) \end{aligned} \tag{4.13}$$

称上式为**等距牛顿基本插值多项式。**

如设，$x = x_0 + th$，则上式变为

$$\begin{aligned} f_n(x_0 + th) = y_0 &+ \frac{\Delta y_0}{1!}t + \frac{\Delta^2 y_0}{2!}t(t-1) + \cdots + \\ &+ \frac{\Delta^n y_0}{n!}t(t-1)\cdots(t-n+1) \end{aligned} \tag{4.14}$$

称此式为牛顿前插多项式。

实际计算多项式时，仅需计算各阶差分，按差分定义(4.11)，列差分表，计算如下：

x_i	y_i	Δy_i	$\Delta^2 y_i$	$\Delta^3 y_i$
x_0	y_0			
x_1	y_1	Δy_0		
x_2	y_2	Δy_1	$\Delta^2 y_0$	
x_3	y_3	Δy_2	$\Delta^2 y_1$	$\Delta^3 y_0$

注意(4.14)式中所用的差分位于差分表的上斜行。

此时 $f_n(x)$ 的余项变为

$$R_n(f, x) = \frac{h^{n+1} f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} t(t-1)\cdots(t-n) \tag{4.15}$$

其中，$\xi\in[x_0, x_0+nh]$，记$M_{n+1}=\max\limits_{x\in[x_0,x_n]}|f^{(n+1)}(x)|$

其余项估计式为

$$|R_n(f,x)|\leqslant\frac{h^{n+1}M_{n+1}}{(n+1)!}|t(t-1)\cdots(t-n)| \qquad (4.15)$$

2　牛顿后插多项式

如果插值条件不变，而设 $x=x_n+th, t<0$，即 x 可用 x_n 表示时，插值多项式又如何计算呢？为此，先将节点按由大到小的顺序排列，得函数表：

x	x_n	x_{n-1}	$\cdots$	x_1	x_0
y	y_n	y_{n-1}	$\cdots$	y_1	y_0

于是有牛顿基本插值多项式为

$$\begin{aligned}f_n(x)=&f(x_n)+f(x_n,x_{n-1})(x-x_n)+\\&+f(x_n,x_{n-1},x_{n-2})(x-x_n)(x-x_{n-1})+\cdots\\&+f(x_n,x_{n-1},\cdots,x_0)(x-x_n)(x-x_{n-1})\cdots(x-x_1)\end{aligned} \qquad (4.16)$$

注意到差商的对称性，上式可改写成

$$\begin{aligned}f_n(x)=&f(x_n)+f(x_{n-1},x_n)(x-x_n)\\&+f(x_{n-2},x_{n-1},x_n)(x-x_{n-1})(x-x_n)+\cdots\\&+f(x_0,x_1,x_2,\cdots,x_n)(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n)\end{aligned}$$

利用差商与向前差分的关系，又可写成

$$\begin{aligned}f_n(x)=&f(x_n)+\frac{\Delta y_{n-1}}{h}(x-x_n)\\&+\frac{\Delta^2 y_{n-2}}{2!h^2}(x-x_{n-1})(x-x_n)+\\&\cdots+\frac{\Delta^n y_0}{n!h^n}(x-x_1)\cdots(x-x_n)\end{aligned} \qquad (4.16)_1$$

如设，$x=x_n+th, t<0$，则上式变为

$$f_n(x_n+th)=y_n+\frac{\Delta y_{n-1}}{1!}t+\frac{\Delta^2 y_{n-2}}{2!}t(t+1)+\cdots+$$

$$+\frac{\Delta^n y_0}{n!}t(t+1)\cdots(t+n-1) \quad (4.17)$$

把上式称为牛顿后插多项式．它所用的向前差分在差分表中是下斜行．

$f_n(x_n+th)$的余项为

$$\overline{R}_n(f,x)=\frac{h^{n+1}f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}t(t+1)\cdots(t+n)$$

其余项估计式为

$$|\overline{R}_n(f,x)|\leqslant\frac{h^{n+1}M_{n+1}}{(n+1)!}|t(t+1)\cdots(t+n)| \quad (4.18)$$

根据前、后插值多项式的想法，如果要求中间某节点附近$\overline{x}$的函数值$f(\overline{x})$时，那么就把所选节点，按它们与$\overline{x}$的距离远近，逐个由近到远地重新排列出来，作牛顿基本插值多项式，再注意差商的对称性、差商与差分的关系，便可推出所谓中间插值多项式．作为练习留给读者．

在实际计算时，可把(4.14)、(4.17)写成递推形式．以$n=4$为例，前插多项式写成如下形式．当$n=4$时前插多项式为

$$f_4(x_0+th)=\left\{\left[\left(\frac{\Delta^4 y_0}{4!}(t-3)+\frac{\Delta^3 y_0}{3!}\right)(t-2)+\right.\right.$$

$$\left.\left.+\frac{\Delta^2 y_0}{2!}\right](t-1)+\Delta y_0\right\}t+y_0 \quad (4.14)_1$$

后插多项式为

$$f_4(x_4+th)=\left\{\left[\left(\frac{\Delta^4 y_0}{4!}(t+3)+\frac{\Delta^3 y_1}{3!}\right)(t+2)+\right.\right.$$

$$\left.\left.+\frac{\Delta^2 y_2}{2!}\right](t+1)+\frac{\Delta y_3}{1!}\right\}t+y_4 \quad (4.17)_1$$

最后指出，一阶差分是由各节点的函数值计算出来的，而

高阶差分又是由低阶差分计算出来的。因此，当y_i有个误差ε时，在差分表中，误差ε会随着差分的阶数的增高不仅扩散而且还要增大。这样就影响到高阶差分的准确性。所以，在实际中用到四阶差分即可，不宜用更高阶的差分。

3　计算实例

例 5　已知函数表

x	-1	0	1	2	3
y	0	2	-1	0	1

用等距插值多项式计算$f\left(-\frac{1}{2}\right)$、$f\left(\frac{5}{2}\right)$的近似值。

解　先作差分表

i	x_i	y_i	Δy_i	$\Delta^2 y_i$	$\Delta^3 y_i$	$\Delta^4 y_i$
0	-1	0				
1	0	2	2			
2	1	-1	-3	-5		
3	2	0	1	4	9	
4	3	1	1	0	-4	-13

其次计算t：因为

$$h=1,\qquad x=-\frac{1}{2},\qquad x_0=-1$$

所以
$$t=\frac{x-x_0}{h}=-\frac{1}{2}-(-1)=\frac{1}{2}$$

利用(4.14)$_1$来计算$f\left(-\frac{1}{2}\right)$的近似值：

$$f\left(\frac{1}{2}\right)\doteq\left\{\left[\left(-\frac{13}{4!}\left(\frac{1}{2}-3\right)+\frac{9}{3!}\right)\left(\frac{1}{2}-2\right)+\frac{-5}{2!}\right]\times\left(\frac{1}{2}-1\right)+\frac{2}{1!}\right\}\left(\frac{1}{2}\right)+0$$

$$\doteq 2.6953125$$

求 $f\left(\frac{5}{2}\right)$的值，因$x=\frac{5}{2}$，靠近$x_4=3$，所以

$$t=\frac{x-x_4}{h}=\frac{-1}{2}$$

利用（4.17），得

$$f\left(\frac{5}{2}\right)=\left\{\left[\left(\frac{-13}{4!}\left(-\frac{1}{2}+3\right)-\frac{4}{3!}\right)\left(-\frac{1}{2}+2\right)+\frac{0}{2!}\right]\left(-\frac{1}{2}+1\right)+\frac{1}{1!}\right\}\left(-\frac{1}{2}\right)+1$$

$$\doteq 1.2578125$$

习　题　4.4

1　证明n阶差商的性质。若

$$F(x)=cf(x)+dg(x)$$

则

$$F(x_0,x_1,\cdots,x_n)=cf(x_0,x_1,\cdots,x_n)+dg(x_0,x_1,\cdots,x_n)$$

2　证明n次多项式的n阶差商为常数。

3　已知函数表

x	0	1	4	3	6
y	0	-7	8	5	14

求牛顿基本插值多项式。

4　已知正弦函数表

x	21°	22°	24°	25°
y	0.35537	0.37461	0.40674	0.42262

求 sin23°之值。

5　已知函数表

x	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
y	1.6487	1.8221	2.0138	2.2255	2.4596

求　$f(0.55)$，$f(0.85)$　之值。

6　给出$\sin x$在0.4(0.1)0.8的值，如果使用二次插值求$\sin 0.63891$的近似值。问如何选节点，才使其近似值的误差较小？且具体比较计算结果？

7　设$f(x)$在$[x_0,x_n]$上有连续的n阶导数，求证在等距节点时，差分与导数存在如下关系

（1）$\Delta^n y_0 = h^n f^{(n)}(\xi)$，$x_0<\xi<x_n$。

（2）$\lim\limits_{h\to 0}\dfrac{\Delta^n y_0}{h^n} = f^{(n)}(x_0)$。

8　若 $F(x)=c_1f(x)+c_2g(x)$，c_1,c_2 为常数，则

$$\Delta^k F(x_i) = c_1\Delta^k f(x_i) + c_2\Delta^k g(x_i)$$

9　证明：对某确定的x_0，当$h\to 0$时，(4.13) 成为台劳多项式。

10　证明：n次多项式$P(x)$的一阶差分是$n-1$次多项式，它的n阶差分为常数，而$n+1$阶差分等于零。

11　证明下列重要等式：

（1）$\Delta^k y_i = y_{i+k} - C_k^1 y_{i+k-1} + C_k^2 y_{i+k-2} - \cdots + (-1)^k y_i$；

（2）$y_n = y_0 + C_n^1\Delta y_0 + C_n^2\Delta^2 y_0 + \cdots\cdots + \Delta^n y_0$；

（3）$\Delta^k y_0 + \Delta^k y_1 + \cdots + \Delta^k y_n = \Delta^{k-1} y_{n+1} - \Delta^{k-1} y_0$。

12　用内插法求矩阵

$$A=\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

的特征多项式$\varphi(\lambda)$。

〔提示：任给λ的四个值λ_0、λ_1、λ_2、λ_3，计算出$\varphi(\lambda_i)$然后作内插多项式。〕

§5 爱尔米特(Hermite)插值多项式

在实际问题中，对所构造的插值多项式，不仅要求通过点(x_i, y_i)，$i=0,1,2,\cdots,k$，同时还要求在x_i上，若干阶导数值也与被插函数的导数值相等。把此插值多项式称为爱尔米特插值多项式或称带导数的插值多项式，用记号$H(x)$表示它。其求法同不带导数的插值多项式的求法一样。而且也有两种表达形式：拉格朗日——爱尔米特多项式和牛顿——爱尔米特插值多项式。可是当插值条件一样时，如不计舍入误差，其两种形式虽不相同，但都对应同一多项式。并且可以从一种形式推出另一种形式。

本节主要介绍牛顿——爱尔米特多项式的构造方法。而拉格朗日——爱尔米特多项式的构造方法，请读者练习推导之。

为了便于学习，先看一个简单例子。

例6 已知函数表

x	x_0	x_1
y	y_0	y_1
y'	y'_0	

(5.1)

求一个插值多项式$H(x)$，使其满足如下条件：

$$H(x_0)=f(x_0),\quad H(x_1)=f(x_1)$$
$$H'(x_0)=f'(x_0) \tag{5.2}$$

解 先由函数表

x	x_0	x_1
y	y_0	y_1

作线性插值。即为

$$f_1(x)=f(x_0)+f(x_0,x_1)(x-x_0) \tag{5.3}$$

再注意到$H(x)$与$f_1(x)$在节点x_0, x_1上函数值相同，即

$$H(x_0)=f_1(x_0)=y_0$$

$$H(x_1)=f_1(x_1)=y_1$$

于是，它们的差，可设为

$$H(x)-f_1(x)=K(x-x_0)(x-x_1) \tag{5.4}$$

其中K为待定常数。上式又可记为

$$H(x)=f_1(x)+K(x-x_0)(x-x_1) \tag{5.5}$$

为确定K，对上式求导，得

$$H'(x)=f_1'(x)+K(x-x_0+x-x_1)$$

令，$x=x_0$，代入上式，且注意插值条件$H'(x_0)=y'_0$，得

$$H'(x_0)=f'_1(x_0)+K(x_0-x_1)$$

$$=f(x_0,x_1)+K(x_0-x_1)=y'_0$$

于是，有

$$K=\frac{f(x_0,x_1)-y'_0}{x_1-x_0} \tag{5.6}$$

将上式代入(5.5)，得

$$H(x)=f_1(x)+\frac{f(x_0,x_1)-y'_0}{x_1-x_0}(x-x_0)(x-x_1)$$

$$=f(x_0)+f(x_0,x_1)(x-x_0)$$

$$+\frac{f(x_0,x_1)-y'_0}{x_1-x_0}(x-x_0)(x-x_1) \tag{5.7}$$

可以验证，(5.7)的$H(x)$确实满足插值条件(5.2)。

同时，可以看到，构造牛顿——爱尔米特插值多项式，完全采用牛顿插值的构造思想。

最后，也可把(5.7)整理成拉格朗日形式：

$$H(x)=\left(\frac{x-x_0+x_1-x_0}{x_1-x_0}\right)\left(\frac{x_1-x}{x_1-x_0}\right)y_0$$

$$+\left(\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)^2 y_1$$

$$+\left(\frac{x_1-x}{x_1-x_0}\right)(x-x_0)y'_1 \tag{5.8}$$

下面介绍较一般的埃尔米特插值．

已知函数$f(x)$的函数表：

x	x_0	x_1	……	x_m	…	x_n
y	y_0	y_1	……	y_m	…	y_n
y'	y'_0	y'_1	……	y'_m		

（5.9）

求一个插值多项式$H(x)$，使其满足如下条件：

$$H(x_i)=y_i,\quad i=0,1,2,\cdots,n \qquad (5.10)_1$$

$$H'(x_i)=y'_i,\quad i=0,1,2\cdots,m \qquad (5.10)_2$$

为求此多项式，首先分析插值条件的个数，共为$m+n+2$个，则所构造的$H(x)$的次数，一般是不超过$m+n+1$次多项式．于是，按牛顿插值的构造思想，可设

$$H(x)=f_n(x)+P_m(x)\{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)\} \qquad (5.11)$$

其中$f_n(x)$是由条件$(5.10)_1$所作的牛顿基本插值多项式；$P_m(x)$为待定的m次多项式．

显然

$$H(x_i)=f_n(x_i)=y_i,\quad i=0,1,2\cdots,n$$

为确定$P_m(x)$，对(5.11)式求导，得

$$H'(x)=f'_n(x)+P'_m(x)\omega(x)+P_m(x)\omega'(x) \qquad (5.12)$$

其中

$$\omega(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$$

令　$x=x_i,i=0,1,2,\cdots m$，且利用条件$(5.10)_2$，代入上式，得

$$H'(x_i)=f'_n(x_i)+P_m(x_i)\omega'(x_i)=y'_i$$

即

$$P_m(x_i)=\frac{y'_i-f'_n(x_i)}{\omega'(x_i)},\quad i=0,1,2,\cdots,m \qquad (5.13)$$

于是，把求$P_m(x)$的问题，变成已知$P_m(x)$的函数表

x	x_0	x_1	……	x_m
$P_m(x)$	$P_m(x_0)$	$P_m(x_1)$	……	$P_m(x_m)$

其中$P_m(x_i)$是由(5.13)式计算得来的。作一个次数不超过m的插值多项式$f_m(x)$（或$L_m(x)$）使其满足

$$f_m(x_i)=P_m(x_i),\quad i=0,1,2,\cdots,m$$

又因为$P_m(x)$为小于或等于m次多项式，所以由§3习题4.3第9题知，必有

$$f_m(x)\equiv P_m(x)$$

即由(4.3)式得

$$\begin{aligned}P_m(x)&=P_m(x_0)+P_m(x_0,x_1)(x-x_0)+\cdots\\&\quad+P_m(x_0,\cdots,x_m)(x-x_0)\cdots(x-x_{m-1})\\&=\sum_{i=0}^{m}P_m(x_0,x_1,\cdots,x_i)(x-x_0)\cdots(x-x_{i-1})\end{aligned}\tag{5.14}$$

其中令　$x-x_{-1}=1$.将上式代入(5.11)式,便得满足插值条件：

$$H(x_i)=y_i\qquad(i=0,1,\cdots\cdots,n)$$

$$H'(x_i)=y'_i\qquad(i=0,1,\cdots\cdots,m)$$

的埃尔米特插值多项式。

此时，(5.11)式是牛顿形式的。

如果将(5.11)式中$f_n(x)$、$P_m(x)$换成拉格朗日插值多项式$L_n(x)$、$L_m(x)$时，则(5.11)可改写成

$$H(x)=L_n(x)+P_m(x)\omega(x)\tag{5.11$_1$}$$

其中

$$P_m(x)=\sum_{i=0}^{m}l_i(x)P_m(x_i)$$

$$P_m(x_i)=\frac{y'_i-L'_n(x_i)}{\omega'(x_i)},\quad i=0,1,\cdots,m$$

当然，我们也可以把它改写成完全拉格朗日形式：

$$H(x)=\sum_{i=0}^{n}h_i(x)y_i+\sum_{i=0}^{m}\bar{h}_i(x)y'_i\tag{5.15}$$

其中

$$\overline{h_i}(x)=(x-x_i)l_{ni}(x)l_{mi}(x) \tag{5.16}$$

$$h_i(x)=\begin{cases}[1-(l'_{ni}(x_i)+l'_{mi}(x_i))(x-x_i)]l_{ni}(x)l_{mi}(x) & i=0,1,\cdots,m \\ l_{ni}(x)\dfrac{\omega_m(x)}{\omega_m(x_i)} & i=m+1,\cdots,n\end{cases} \tag{5.17}$$

$$l_{ni}(x)=\frac{\omega_n(x)}{(x-x_i)\omega'_n(x_i)} \tag{5.18}$$

$$l_{mi}(x)=\frac{\omega_m(x)}{(x-x_i)\omega'_m(x_i)}$$

及

$$\omega_n(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$$
$$\omega_m(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_m)$$

例 7 已知函数$f(x)$的函数表

x	x_0	x_1
y	y_0	y_1
y'	y'_0	y'_1

求其爱尔米特插值多项式$H(x)$，使它满足条件

$$H(x_0)=y_0,\ H(x_1)=y_1$$
$$H'(x_0)=y'_0,\ H'(x_1)=y'_1$$

解 因为 $n=m=1$，所以，由(5.11)式，得

$$H(x)=f_1(x)+p_1(x)(x-x_0)(x-x_1)$$

其中 $f_1(x)=f(x_0)+f(x_0,x_1)(x-x_0)$

$$p_1(x)=p_1(x_0)+p_1(x_0,x_1)(x-x_0)$$

$$p_1(x,x_1)=\frac{p_1(x_1)-p_1(x_0)}{x_1-x_0}$$

及

$$p_1(x_0)=\frac{f(x_0,x_1)-y'_0}{x_1-x_0},\quad p_1(x_1)=\frac{y'_1-f(x_0,x_1)}{x_1-x_0}$$

或整理成如下形式：

$$H(x)=f(x_0)+f(x_0,x_1)(x-x_0)+$$

$$+\left\{\frac{f(x_0,x_1)-y'_0}{x-x_0}+\right.$$

$$\left.+\frac{y'_1+y'_0-2f(x_0,x_1)}{(x_1-x_0)^2}(x-x_0)\right\}(x-x_0)(x-x_1) \quad (5.19)$$

也可以按(5.15)式求$H(x)$.为此先确定以下事实：

$$\omega_2(x)=(x-x_0)(x-x_1)$$

$$\omega'_2(x_0)=x_0-x_1,\quad \omega'_2(x_1)=x_1-x_0$$

$$l_{2,0}(x)=\frac{x-x_1}{x_0-x_1},\quad l_{2,1}(x)=\frac{x-x_0}{x_1-x_0}$$

$$l'_{2,0}(x_i)=\frac{1}{x_0-x_1},\qquad i=0,1$$

$$l'_{2,1}(x_i)=\frac{1}{x_1-x_0},\qquad i=0,1$$

代入 $h_i(x)$及$\bar{h}_i(x)$中，得

$$h_0(x)=\left(1+2\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)\left(\frac{x_1-x}{x_1-x_0}\right)^2$$

$$h_1(x)=\left(1+2\frac{x_1-x}{x_1-x_0}\right)\left(\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)^2$$

$$\bar{h}_0(x)=(x-x_0)\left(\frac{x_1-x}{x_1-x_0}\right)^2$$

$$\bar{h}_1(x)=(x-x_1)\left(\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)^2$$

将上述结果代入(5.15)式，得

$$H(x)=\left(1+2\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)\left(\frac{x_1-x}{x_1-x_0}\right)^2 y_0+$$

$$+\left(1+2\frac{x_1-x}{x_1-x_0}\right)\left(\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)^2 y_1+$$

$$+ (x-x_0)\left(\frac{x_1-x}{x_1-x_0}\right)^2 y'_0$$

$$+ (x-x_1)\left(\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)^2 y'_1 \tag{5.20}$$

(一) 爱尔米特插值余项

它的推导完全与以前相同。我们仅举例说明之。

例 8　求例 6 的插值余项。

解　设其余项为

$$R(H,x)=f(x)-H(x)$$

由条件(5.2)知，$R(H,x_0)=R(H,x_1)=0$，及

$$R'(H,x_0)=0$$

从而，可设

$$R(H,x)=K(x)(x-x_0)^2(x-x_1) \tag{5.21}$$

其中$K(x)$为待定函数。

为确定函数$K(x)$，引入辅助函数

$$Q(t)=f(t)-H(t)-K(x)(t-x_0)^2(t-x_1)$$

由条件(5.2)及(5.21)知，$Q(t)$有四个零点：x，x_1及x_0，此时x_0为二重零点。利用罗尔定理，推得$Q'''(t)$在x_0, x_1及x所包含区间内至少有一个零点。设此零点为ξ，则

$$Q'''(\xi)\equiv f'''(\xi)-K(x)\cdot 3!=0$$

即

$$K(x)=\frac{f'''(\xi)}{3!}$$

将上式代入(5.21)得

$$R(H,x)=\frac{f'''(\xi)}{3!}(x-x_0)^2(x-x_1) \tag{5.21$_1$}$$

一般情况的余项为

$$R(H,f)=\frac{f^{(m+n+2)}(\xi)}{(m+n+2)!}\omega_m(x)\omega_n(x) \tag{5.22}$$

其中 ξ 在 $x_0, x_1, \cdots, x_n$，及 x 所确定的区间 $[a, b]$ 内，且假定 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上有 $m+n+2$ 阶导数存在。

习　题　4.5

1　求满足条件

x	1	2	3
y	2	4	12
y'		3	

的插值多项式及余项。

2　求证满足条件

x	x_j	x_{j+1}
y	y_j	y_{j+1}
y'	m_j	m_{j+1}

的插值多项式为

$$\begin{aligned} S_j(x) = {} & m_j \frac{(x_{j+1}-x)^2(x-x_j)}{h_j^2} + \\ & - m_{j+1} \frac{(x-x_j)^2(x_{j+1}-x)}{h_j^2} + \\ & + y_j \frac{(x_{j+1}-x)^2[2(x-x_j)+h_j]}{h_j^3} + \\ & + y_{j+1} \frac{(x_j-x)^2[2(x_{j+1}-x)+h_j]}{h_j^3} \end{aligned} \tag{5.23}$$

其中，$h_j = x_{j+1} - x_j$。

3　求满足条件

x	1	2
y	2	3
y'	1	-1

的爱尔米特插值多项式。

4　利用埃尔米特插值法，计算函数近似值．若已知

$\sin 0° = 0.000,\quad \cos 0° = 1.000$

$\sin 30° = 0.500,\quad \cos 30° = 0.866$

试计算$\sin 15°$之近似值。

5　求证满足条件

x	x_j	x_{j+1}
y	y_j	y_{j+1}
y''	M_j	M_{j+1}

的爱尔米特——拉格朗日插值多项式为

$$\widetilde{S}_j(x) = M_j\frac{(x_{j+1}-x)^3}{6(x_{j+1}-x_j)} + M_{j+1}\frac{(x-x_j)^3}{6(x_{j+1}-x_j)} + \left(y_j - \frac{M_j(x_{j+1}-x_j)^2}{6}\right)\frac{x_{j+1}-x}{x_{j+1}-x_j} + \left(y_{j+1} - \frac{M_{j+1}(x_{j+1}-x_j)^2}{6}\right)\frac{x-x_j}{x_{j+1}-x_j} \tag{5.24}$$

6　求题２、题５的爱尔米特——牛顿插值多项式。

7　求在(5.9)函数表中$m=n$时，爱尔米特插值多项式及其余项。

8　已知函数表

x	x_0	x_1	x_2
y	y_0		y_2
y'		y'_1	

求一个二次插值函数$H(x)$，使其满足条件

$$H(x_0) = y_0, H'(x_1) = y'_1, H(x_2) = y_2$$

其中$x_0 \neq x_2$。

9　已知函数表

x	x_0	x_1	x_2
y	y_0		y_2
y'		y'_1	
y''		y''_1	

求一个三次爱尔米特插值函数$H(x)$，使它满足条件

$$H(x_0)=y_0,\ H'(x_1)=y'_1,\ H''(x_1)=y''_1,\ H(x_2)=y_2$$

其中$x_0\neq x_2$。

§6 三次样条插值

前面已经讲过，通过平面上$n+1$个不同的已知点$(x_i,\ y_i)$（或者说$n+1$个插值条件）能作一条光滑的n次代数曲线。但当点很多时，除了所作的插值多项式的次数高，计算复杂外，如从逼近程度来看，当$n>6$时，就不够理想了。（见本书学习指导）因此，人们采用分段低次插值逼近的办法去克服这一缺点。如用分段线性插值函数去逼近被插值函数，也就是用折线去替代原曲线；或者用分段抛物插值函数去逼近被插值函数，也就是用分段二次曲线去替代原曲线（见图4.6,图4.7）。

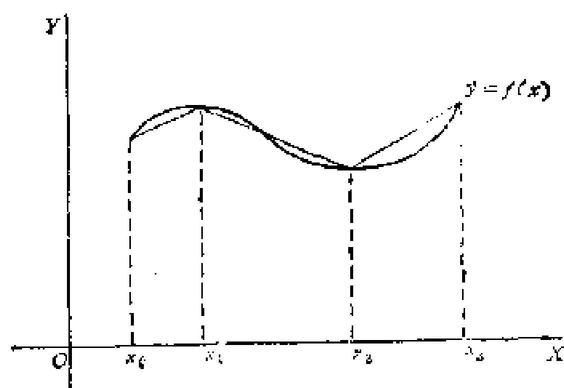


图4.6

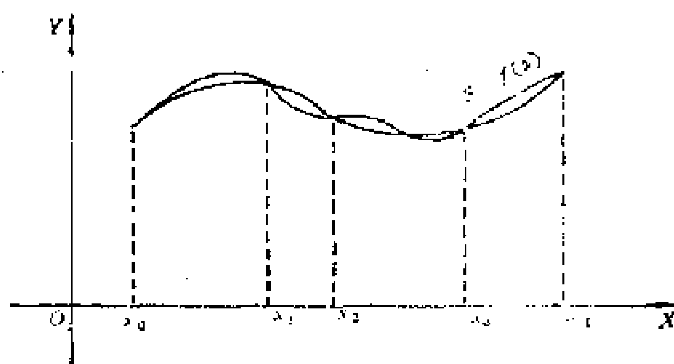


图4.7

把这样求插值函数的办法，叫做

分段插值．显然，这样的插值函数，具有次数低，且保持较好的逼近程度．但所得插值曲线在节点上仅保证连续，并不再是光滑的．

可是，在生产、科学实验上，对所做的插值曲线，既要简单又要在曲线的连接处比较光滑．即所作分段插值函数在分段上要求多项式次数低，而在分点（节点）上不仅连续，还存在连续低阶导数．把满足这样条件的插值函数，称为样条**插值函数**，它所对应的曲线称为**样条曲线**，其节点称为样点，把这种插值法称为**样条插值**．

本节仅讨论存在连续一阶、二阶导数的样条插值函数．具体提法如下：

设在$[a, b]$上给出样点上的函数表

x	x_0	x_1	$\cdots$	x_n
y	y_0	y_1	$\cdots$	y_n
y'	m_0			m_n

(6.0)

求作一分段插值函数$S(x)$，使它在$[x_j, x_{j+1}]$上是三次多项式：

$$S_j(x) = A_j x^3 + B_j x^2 + C_j x + D_j \tag{6.1}$$

其中 $x_j \leqslant x \leqslant x_{j+1}$．$j = 0, 1, \cdots, n-1$．

并且它满足如下条件：

1）在样点上，函数值与已给函数值相等，即

$$S(x_j) = y_j, \quad j = 0, 1, 2, \cdots, n \tag{6.2}$$

2）在内样点（除x_0, x_n外）上有直到二阶的连续导数，即

$$S_{j-1}(x_j) = S_j(x_j) \tag{6.3}$$

$$S'_{j-1}(x_j) = S'_j(x_j) \tag{6.4}$$

$$S''_{j-1}(x_j) = S''_j(x_j) \tag{6.5}$$

其中 $j = 1, 2, \cdots, n-1$．

3）在外样点上，导数值与已给导数值相等，即

$$S'(x_0)=m_0,\quad S'(x_n)=m_n \tag{6.6}$$

把满足条件(6.2—6.6)的$S(x)$称为$f(x)$的端点斜率已知的三次样条函数，它所对应的曲线称为三次样条曲线。把此类插值称带端点斜率的三次插值。

如何求$S(x)$呢？按通常办法是列出$4n$个线性方程组，解之，确定系数A_j,B_j,C_j,D_j，从而得三次样条函数$S(x)$。

但是，解$4n$个线性方程组的工作量太大。现在我们利用爱尔米特插值来求$S(x)$，可以减少很多工作量。

假设在区间$[a,b]$上三次样条函数$S(x)$存在。再设$S(x)$在内样点$x_j(j=1,2,\cdots,n-1)$的导数值为m_j，即$S'(x_j)=m_j$。则在$[x_j,x_{j+1}]$上分段函数$S_j(x)$，是满足条件

x	x_j	x_{j+1}
y	y_j	y_{j+1}
y'	m_j	m_{j+1}

(6.6)1

的爱尔米特插值多项式，由习题4.5第2题得

$$\begin{aligned}S_j(x)=&m_j\frac{(x_{j+1}-x)^2(x-x_j)}{h_j^2}-m_{j+1}\frac{(x-x_j)^2(x_{j+1}-x)}{h_j^2}\\&+y_{j+1}\frac{(x-x_j)^2[2(x_{j+1}-x)+h_j]}{h_j^3}\\&+y_j\frac{(x_{j+1}-x)^2[2(x-x_j)+h_j]}{h_j^3}\end{aligned}\tag{6.7}$$

其中　$h_j=x_{j+1}-x_j,j=0,1,\cdots,n-1$。

但是，实际上，$m_j(j=1,2,\cdots,n-1)$是未知的。因此，必须求出m_j，才能由(6.7)确定$S_j(x)$，从而求得$S(x)$。为了确定m_j的值，可由条件

$$S''_{j-1}(x_j)=S''_j(x_j),\quad j=1,2,\cdots,n-1$$

来推出。为此，对$S_j(x)$求两次导数得

$$S''_j(x) = \frac{2m_j}{h_j^2}(3x - 2x_{j+1} - x_j) +$$

$$+ \frac{2m_{j+1}}{h_j^2}(3x - x_{j+1} - 2x_j) +$$

$$+ \frac{6(y_{j+1} - y_j)}{h_j^3}(x_{j+1} + x_j - 2x) \qquad (6.8)$$

同理

$$S''_{j-1}(x) = \frac{2m_{j-1}}{h_{j-1}^2}(3x - 2x_j - x_{j-1}) +$$

$$+ \frac{2m_j}{h_{j-1}^2}(3x - x_j - 2x_{j-1}) +$$

$$+ \frac{6(y_j - y_{j-1})}{h_{j-1}^3}(x_j + x_{j-1} - 2x) \qquad (6.9)$$

令 $x = x_j$，代入（6.8）、（6.9），再代入（6.5），得

$$\frac{2m_{j-1}}{h_{j-1}} + \frac{4m_j}{h_{j-1}} - 6\frac{y_j - y_{j-1}}{h_{j-1}^2} =$$

$$= \frac{-4m_j}{h_j} - \frac{2m_{j+1}}{h_j} + 6\frac{y_{j+1} - y_j}{h_j^2}$$

其中 $j = 1, 2, \cdots, n-1$。把上式整理成为

$$\frac{m_{j-1}}{h_{j-1}} + 2\left(\frac{1}{h_{j-1}} + \frac{1}{h_j}\right)m_j + \frac{m_{j+1}}{h_j}$$

$$= 3\left[\frac{y_{j+1} - y_j}{h_j^2} + \frac{y_j - y_{j-1}}{h_{j-1}^2}\right]$$

以 $\dfrac{h_j h_{j-1}}{h_{j-1} + h_j}$ 乘上式两端，再引入记号

$$\alpha_j = \frac{h_{j-1}}{h_{j-1} + h_j}$$

$$\beta_j = 3\left[\frac{1 - \alpha_j}{h_{j-1}}(y_j - y_{j-1}) + \frac{\alpha_j}{h_j}(y_{j+1} - y_j)\right]$$

$$j = 1, 2, \cdots, n-1 \qquad (6.10)$$

又可简化成如下形式：

$$(1-\alpha_j)m_{j-1}+2m_j+\alpha_j m_{j+1}=\beta_j, \qquad (6.11)$$

$$j=1,2,\cdots,n-1$$

它是含有$n-1$个未知数$m_j(j=1,2,\cdots,n-1)$的$n-1$个线性方程组．此方程组的系数阵为行强对角占优的三对角阵，可用追赶法解之，得m_j，再代入(6.7)，就得所要求的三次样条函数$S(x)$．

例 9　已知$f(x)$的函数表

x	0	1	2	3
$f(x)$	0	2	3	6
$f'(x)$	1			0

求在[0,3]上的三次样条插值函数．

解　此时，$n=3$，$h_j=1$，代入(6.10)计算出

$$\alpha_j=\frac{1}{2},\ j=1,2$$

$$\beta_1=3\left(\frac{1}{2}(y_1-y_0)+\frac{1}{2}(y_2-y_1)\right)=\frac{9}{2}$$

$$\beta_2=21$$

代入(6.11)且注意　$m_0=1,m_3=0$，得

$$\begin{cases}\dfrac{1}{2}+2m_1+\dfrac{1}{2}m_2=\dfrac{9}{2}\\ \dfrac{1}{2}m_1+2m_2+\dfrac{1}{2}\times 0=21\end{cases}$$

整理成为

$$\begin{cases}2m_1+\dfrac{1}{2}m_2=4\\ \dfrac{1}{2}m_1+2m_2=21\end{cases}$$

解得

$$m_1=-\frac{2}{3},\qquad m_2=\frac{32}{3}$$

对(6.7)式，令 $j=0$，且代入

$$y(x_0)=0,\ y(x_1)=2,\ x_0=0,\ x_1=1$$

及 $$m_0=1,\qquad m_1=-\frac{2}{3}$$

得

$$S_0(x)=1\times\frac{(1-x)^2(x-0)}{1^2}-\left(-\frac{2}{3}\right)\frac{(x-0)^2(1-x)}{1^2}$$

$$+0+2\times\frac{(x-0)^2[2(1-x)+1]}{1^3}$$

$$=\frac{x}{3}(3+14x-11x^2)\qquad x\in[0,1]$$

同理，令$j=1$,$j=2$，由(6.7)求得$S_1(x)$,$S_2(x)$，把它们写成如下分段函数形式：

$$S(x)=\begin{cases}\frac{x}{3}(-11x^2+14x+3) & x\in[0,1]\\ \frac{1}{3}(24x^3-91x^2+108x-35) & x\in[1,2]\\ \frac{1}{3}(-46x^3+329x^2-732x+525) & x\in[2,3]\end{cases}$$

即为满足已知函数表的三次样条插值函数。

如果用样条插值函数计算函数值$f(a)$时，只要判定插值点 a 的所在区间，把它代入该区间所对应的爱尔米特插值多项式$S_j(x)$中，便是所求函数值$f(a)$的近似值$S_j(a)$。即

$$f(a)\doteq S(a)=S_j(a)$$

其中 j 表示 a 所在区间$[x_j,x_{j+1}]$的下标。

注意，由于(6.6) 的条件不同，（一般称此条件为边界条件），而其它的要求不变时，所得的样条函数也是不同的。例如已知函数表(6.0)中将端点已知斜率，换成已知端点曲率，

$$y''(x_0)=M_0,\ y''(x_n)=M_n$$

而其它条件不变时，则我们可以利用习题4.5第5题的$\widetilde{S}_j(x)$作为分段多项式，再利用(6.4)式，导出关于 $M_j(j=1,2,\cdots,$

$n-1$)的$n-1$个方程的线性方程组，解此方程组，将解M_j，代入$\widetilde{S}_j(x)$ 中，最后得已知曲率边界的三次样条函数$\widetilde{S}(x)$。具体推导由读者完成。

最后，还应指出，样条函数不一定必须是逐段为三次多项式，可以根据实际需要，确定每段的次数，且可以是不相同的。这也反映出样条插值的灵活性，故，目前被广泛地应用于工程计算中。

其误差估计见李岳生、黄友谦编*《数值逼近》第137页。

习　　题 4.6

1　已知函数表

x	1	2	3
y	2	4	12
y'	1		-1

求其已知斜率的三次样条函数。

2　已知函数表

x	x_0	x_1	……	x_n
y	y_0	y_1	……	y_n
y''	M_0			M_n

求其已知曲率边界的三次样条函数。

3　已知函数表

x	0	1	2	3
y	0	2	3	16
y''	0			6

求其已知曲率边界的三次样条函数。

---

* 人民教育出版社，1978

§7 数值微分

在微积分中，求函数的导数是通过极限定义去完成的。如果已知其解析式，则按求导法则去做即可。但当函数以函数表形式给出时，又要求它的导函数或某点的导数值，就不能用定义与法则来实现之，而可应用插值法，先把满足函数表的近似函数求出，再对它求导数，把此导函数就作为被插值函数的近似导函数。

即由已给函数表

x	x_0	x_1	$\cdots$	x_n
$f(x)$	y_0	y_1	$\cdots$	y_n

(7.0)

作出满足条件

$$y_n(x_i) = y_i \tag{7.1}$$

的插值多项式$y_n(x)$。也就是

$$f(x) = y_n(x) + R_n(f,x) \tag{7.2}$$

对上式求导，得

$$f'(x) = y'_n(x) + R'_n(f,x) \tag{7.3}$$

当$|R'_n(f,x)|$足够小时，就可以把$y'_n(x)$作为$f'(x)$的近似函数。

同理，当 $x=\overline{x}$时，如$|R'_n(f,\overline{x})|$足够小，则把值$y'_n(\overline{x})$作为$f'(\overline{x})$的近似值。

求其K阶导数的近似，也如此办理。即

$$f^{(k)}(x) = y_n^{(k)}(x) + R_n^{(k)}(f,x) \tag{7.4}$$

当$|R_n^{(k)}(f,x)|$足够小时，就认为

$$f^{(k)}(x) \doteq y_n^{(k)}(x) \tag{7.5}$$

称$R_n^{(k)}(f,x)$为数值微分的余项。

在本节仅介绍等距节点的数值微分公式，其它情况，类似可以求之。

设节点为等距时，步长为h，则

$$x_i = x_0 + ih \qquad i = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots\cdots n.$$

于是由牛顿前插公式得

$$f(x) = f^n(x) + R_n(f, x) \tag{7.6}$$

其中
$$f_n(x) = y_0 + t\Delta y_0 + \frac{t(t-1)}{2!}\Delta^2 y_0 + \cdots$$

$$+ \frac{t(t-1)\cdots(t-n+1)}{n!}\Delta^n y_0 \tag{7.7}$$

$$R_n(f, x) = \frac{h^{n+1} f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega(t) \tag{7.8}$$

$$\omega(t) = t(t-1)\cdots(t-n),\quad x = x_0 + th$$

对(7.6)求关于x的导数，得

$$f'(x) = f'_n(x) + R'_n(f, x) \tag{7.9}$$

当$|R'_n(f, x)|$足够小时，就认为

$$f'(x) \doteq f'_n(x) \tag{7.10}$$

因为

$$\frac{df_n(x)}{dx} = \frac{df_n(x)}{dt}\cdot\frac{dt}{dx} = \frac{1}{h}\ \frac{df_n(x)}{dt}$$

所以

$$f'_n(x) = \frac{1}{h}\left[\Delta y_0 + \frac{2t-1}{2}\Delta^2 y_0 + \frac{3t^2-6t+2}{6}\Delta^3 y_0 + \right.$$

$$\left. + \frac{2t^3-9t^2+11t-3}{12}\Delta^4 y_0 + \cdots\right] \tag{7.11}$$

而余项为

$$R'_n(f, x) = \frac{h^n}{(n+1)!}\ \frac{d}{dt}(f^{(n+1)}(\xi)\omega(t)) \tag{7.12}$$

例10　设某物体作直线运动，测得时间t（秒）与距离$y = f(t)$（厘米）的数据表如下：

i	0	1	2	3	4	5
x_i	0.00	0.01	0.02	0.03	0.04	0.05
y_i	0.000	1.519	6.031	13.397	23.396	35.721

i	6	7	8	9
x_i	0.06	0.07	0.08	0.09
y_i	50.000	65.798	82.635	100.000

求当$x=0$，0.01，0.02，0.03，0.04时的瞬时速度．

解 设速度记为$U(t)$，则先求其近似速度函数，然后，求它们的瞬时速度．为此，先作差分表

i	x_i	y_i	Δy_i	$\Delta^2 y_i$	$\Delta^3 y_i$	$\Delta^4 y_i$
0	0.00	0.000				
1	0.01	1.519	1.519			
2	0.02	6.031	4.512	2.993		
3	0.03	13.397	7.366	2.854	−0.139	
4	0.04	23.396	9.999	2.633	−0.221	−0.082
5	0.05	35.721	12.325	2.326	−0.307	−0.086
6	0.06	50.000	14.279	1.954	−0.372	−0.065
7	0.07	65.798	15.798	1.519	−0.435	−0.063
8	0.08	82.635	16.837	1.039	−0.480	−0.045
9	0.09	100.000	17.365	0.528	−0.511	−0.031

当$n=4$时，由(7.11)得

$$U(t)\doteq f_4'(t)=\frac{1}{h}\left[\Delta y_0+\frac{2t-1}{2}\Delta^2 y_0+\right.$$

$$+\frac{3t^2-6t+2}{6}\Delta^3 y_0+$$

$$\left.+\frac{2t^3-9t^2+11t-3}{12}\Delta^4 y_0\right] \tag{7.13}$$

其中　$x_0=0$　$x=ht=0.01t$.

为计算$U(0)$之近似值，先计算 t 值：

$$t=\frac{x-x_0}{h}=0$$

代入(7.13)，且代入差分值，得

$$U(0)=\frac{1}{0.01}\left(1.519-\frac{1}{2}(2.993)+\frac{1}{3}(-0.139)-\frac{1}{4}(-0.082)\right)=-0.33\text{厘米/秒}$$

同理可求出$U(0.01)\cdots$的近似值，把它们与准确值一起列在下表：

x_i	0	0.01	0.02	0.03	0.04
U_i	-0.33	303.28	596.34	872.78	1121.4
$\overline{U}_i$	0.00	303.08	596.98	872.66	1121.9

其中$\overline{U}_i$是由已知的路程方程

$$y=100\left(1-\cos\frac{50\pi x}{9}\right) \tag{7.14}$$

的速度

$$\overline{U}=\frac{dy}{dx}=\frac{500\pi}{9}\sin\frac{50\pi x}{9}$$

在 t_i 的值。已知函数表是由(7.14)给出的。从上表看出误差不算太大。

值得注意的是，实际上经常用的是在节点上的数值微分公式。

如当$t=1$时，取$n=1$，则(7.9)变成

$$f(x_1)=\frac{1}{h}(y_1-y_0)+\frac{h}{2}f''(\xi) \tag{7.15}$$

当然，t 与 n 可以取其它值，就会得到相应的微分公式，我们仅列以后要用的微分公式：

$$f'(x_1)=\frac{1}{2h}(y_2-y_0)-\frac{h^2}{6}f'''(\xi) \tag{7.16}$$

$$f''(x_1)=\frac{1}{h^2}(y_0-2y_1+y_2)-\frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi) \tag{7.17}$$

还应该注意，即使插值多项式$f_n(x)$收敛于$f(x)$，而$f'_n(x)$也不一定收敛于$f'(x)$。另外，缩小步长h也不一定达到提高精度的目的。因此，在用插值法作数值微分时，要注意误差分析。

习　题　4.7

1　试推导数值微分公式

$$f'(x_0)=\frac{1}{2h}(-3f_0+4f_1-f_2)+\frac{h^2}{3}f'''(\xi)\quad(x_0<\xi<x_2)$$

其中$h=x_{i+1}-x_i$。

2　试推导数值微分公式

$$f'(x_0)=\frac{1}{6h}(-11f_0+18f_1-9f_2+2f_3)-\frac{h^3}{4}f^{(4)}(\xi)$$

$$(x_0<\xi<x_3)$$

其中　$h=x_{i+1}-x_i$。

3　已知函数表

x_i	1.0	1.5	2.0	2.5
y_i	8.00	13.75	21.00	29.75

求$f'(1)$近似值。

4　已知函数表

x_i	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0
y_i	0.20134	0.41075	0.63665	0.88811	1.17520

求$f'(0.2)$之近似值。

§8 最小二乘法

在前节中所介绍的逼近方式是插值逼近：所构造的$y=f(x)$近似函数$f_n(x)$，在节点x_i上，必须满足条件$f_n(x_i)=y_i$。也就是所作的曲线必须通过已知点(x_i, y_i)。可是在科学实验中，所给出的数据经常有观测误差。因此，如果要使所求曲线通过所有点(x_i, y_i)，那么，一方面这条曲线还继续保留着一切观测误差；另一方面，由于观测数据较多，这样的插值多项式的次数也必定很高，这就带来很大不方便，且也不实用，见图4.8。所以，在实际上，只要找到一条曲线，既能反映给定数据的一般趋势，又不出现局部较大地波动即可。此种逼近方式，只要所构造的近似函数$y(x)$与被逼近的函数$f(x)$在区间$[a,b]$上的偏差满足某种要求就行了。比如，要求偏差的平方和为最小，就是一种衡量偏差的方式或逼近方式。把这种逼近方式称为最小平方逼近。

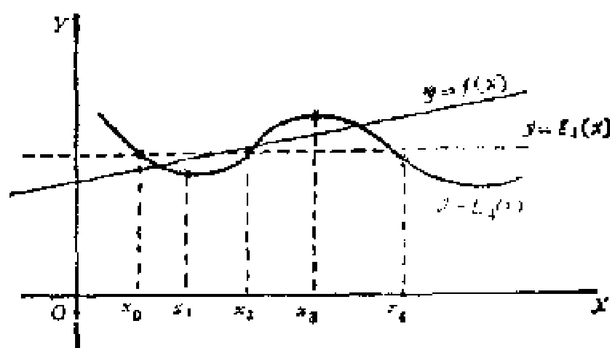


图4.8

如果被逼近的函数，以函数表形式给出时，最小平方逼近又称为最小二乘法。

所谓最小二乘法就是：设$f(x)$在$[a,b]$上有函数表

x	x_0	x_1	$\cdots$	x_n
y	y_0	y_1	$\cdots$	y_n

(8.0)

其中 $y_i=f(x_i)\quad(i=0,1,\cdots,n)$求一个$m(<n)$次多项式

$$g_m(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_m x^m \tag{8.1}$$

使偏差$u_i = g_m(x_i) - y_i \quad (i = 0,1,\cdots,n)$的平方和

$$\sum_{i=0}^{n} [g_m(x_i) - y_i]^2 = \varphi(a_0, a_1, \cdots, a_n) \tag{8.2}$$

取最小值的方法。

为了说明方便，下面对 $m = 2$ 的情形讨论之。此时偏差和

$$\sum_{i=0}^{n} u_i^2 = \sum_{i=0}^{n} [g_2(x_i) - y_i]^2$$

$$= \sum_{i=0}^{n} [a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 - y_i]^2$$

$$= \varphi(a_0, a_1, a_2)$$

显然，$\varphi(a_0, a_1, a_2) \geqslant 0$，要求使$\varphi(a_0, a_1, a_2)$达到极小的极值点，由数学分析知道，必有

$$\frac{\partial \varphi}{\partial a_0} = 0, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial a_1} = 0, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial a_2} = 0$$

也就是

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \varphi}{\partial a_0} &= 2\sum_{i=0}^{n} (a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 - y_i) = 0 \\
\frac{\partial \varphi}{\partial a_1} &= 2\sum_{i=0}^{n} x_i (a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 - y_i) = 0 \\
\frac{\partial \varphi}{\partial a_2} &= 2\sum_{i=0}^{n} x_i^2 (a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 - y_i) = 0
\end{aligned} \tag{8.3}$$

此式又可整理成下式：

$$\begin{aligned}
(n+1) a_0 + a_1 \sum_{i=0}^{n} x_i + a_2 \sum_{i=0}^{n} x_i^2 &= \sum_{i=0}^{n} y_i \\
a_0 \sum_{i=0}^{n} x_i + a_1 \sum_{i=0}^{n} x_i^2 + a_2 \sum_{i=0}^{n} x_i^3 &= \sum_{i=0}^{n} y_i x_i \\
a_0 \sum_{i=0}^{n} x_i^2 + a_1 \sum_{i=0}^{n} x_i^3 + a_2 \sum_{i=0}^{n} x_i^4 &= \sum_{i=0}^{n} y_i x_i^2
\end{aligned} \tag{8.3$_1$}$$

若引入记号

$$S_k=\sum_{i=0}^{n}x_i^k,\quad f_k=\sum_{i=0}^{n}y_ix_i^k \tag{8.4}$$

则(8.3)₁ 又能写成这样的形式：

$$\begin{aligned}S_0a_0+S_1a_1+S_2a_2&=f_0\\S_1a_0+S_2a_1+S_3a_2&=f_1\\S_2a_0+S_3a_1+S_4a_2&=f_2\end{aligned}\tag{8.3$_2$}$$

此时系数矩阵不仅对称而且左对角线元素还相等，称这样的方程组为三阶正规方程组。

在一般情况下，已知$f(x)$在$[a,b]$上的函数表(8.0)，用最小二乘法求其近似多项式$g_m(x)$的步骤如下：

（1）对确定的 m，按（8.4）计算 $3m+2$ 个和的值S_k $(k=0,1,2,\cdots,2m)$及$f_k(k=0,1,2,\cdots,m)$。

（2）列出$m+1$阶正规方程组

$$\sum_{j=0}^{m}S_{k+j}a_j=f_k\quad(k=0,1,2,\cdots,m) \tag{8.5}$$

（3）解正规方程组得$a_j(j=0,1,2,\cdots,m)$，代入(8.1)，便求出离散的最小平方逼近多项式$g_m(x)$。

现在的问题是，正规方程组是否可解，若可解，则该解是否是$\varphi(a_0,a_1,\cdots,a_m)$ 的最小点？回答是肯定的。下面我们来证明它。

定理 正规方程组的解存在且唯一，而且其解就是使$\varphi(a_0,a_1,\cdots,a_m)$ 达到最小的极值点。

证明 只要证明方程组的系数行列式不等于零就行了。用反证法。假定其系数行列式等于零，则对应于(8.5)的齐次方程组

$$\sum_{j=0}^{m}S_{k+j}a_j=0\quad(k=0,1,2,\cdots,m) \tag{8.6}$$

必有非零解。今对方程组中第k个方程乘以a_k，然后对所有的

k 相加，则得

$$\sum_{k=0}^{m}\left\{a_k\sum_{j=0}^{m}S_{k+j}a_j\right\}=\sum_{k=0}^{m}\left\{a_k\sum_{j=0}^{m}\left[\sum_{i=0}^{n}x_i^{k+j}\right]a_j\right\}$$

$$=\sum_{i=0}^{n}\left(\sum_{k=0}^{m}a_k\ x_i^k\right)\cdot\left(\sum_{j=0}^{m}a_j\ x_i^k\right)$$

$$=\sum_{i=0}^{n}\left(\sum_{k=0}^{m}a_k\ x_i^k\right)^2=\sum_{i=0}^{n}(g_m(x_i))^2$$

$$=0$$

由此必有$g_m(x_i)=0(i=0,1,\cdots,n)$，即$m(<n)$次多项式$g_m(x)$的零点个数大于$m$，从而$g_m(x)$必恒为零，即$a_0=a_1=\cdots=a_m$，这与假设矛盾，所以方程组(8.6)只有零解，即它的系数行列式不等于零，从而(8.5)的解存在且唯一。

其次证明正规方程组的解使$\varphi(a_0,a_1,\cdots a_m)$取最小值。

假设

$$F(x)=\sum_{k=0}^{m}b_kx^k \tag{8.7}$$

是不同于$g_m(x)$的任意m次多项式，则

$$\delta=\sum_{i=0}^{n}\{F(x_i)-y_i\}^2-\sum_{i=0}^{n}\{g_m(x_i)-y_i\}^2$$

$$=\sum_{i=0}^{n}\{F(x_i)\}^2-2\sum_{i=0}^{n}F(x_i)\cdot y_i+\sum_{i=0}^{n}y_i^2$$

$$-\sum_{i=0}^{n}\{g_m(x_i)\}^2+2\sum_{i=0}^{n}g_m(x_i)\cdot y_i-\sum_{i=0}^{n}y_i^2$$

合并同类项且配方得

$$\delta=\sum_{i=0}^{n}\{F(x_i)-g_m(x_i)\}^2$$

$$+2\sum_{i=0}^{n}\{[F(x_i)-g_m(x_i)]\times(g_m(x_i)-y_i)\}$$

而右端第二项为

$$2\sum_{k=0}^{m}\{b_k-a_k\}\sum_{i=0}^{n}\{g_m(x_i)-y_i\}x_i^k$$

由(8.3)知，此项为零，于是

$$\delta=\sum_{i=0}^{n}\{F(x_i)-g_m(x_i)\}^2>0$$

即

$$\sum_{i=0}^{n}\{F(x_i)-y_i\}^2>\sum_{i=0}^{n}\{g_m(x_i)-y_i\}^2$$

也就是任意m次多项式与已知函数$f(x)$的偏差平方和都大于多项式$g_m(x)$与$f(x)$的偏差平方和。

即多项式$g(x)$使$\varphi(a_0,a_1,\cdots,a_n)$取最小值．证完。

例11 有一滑轮组，要举起W公斤的重物需要用F公斤的力，实验所得的数据，如下表：

W(公斤)	20	40	60	80	100
F(公斤)	4.35	7.55	10.40	13.80	16.80

求适合上述关系的近似公式。

解 首先，将这些数画在直角坐标系中，从图形上看大致是一条直线，故设

$$g_1(x)=a_0+a_1x$$

按最小二乘法确定$g_1(x)$．此时，$n=4, m=1$，按(8.4)先计算

$$S_0=\sum_{i=0}^{4}x_i^0=5,\qquad f_0=\sum_{i=0}^{4}y_i=52.90$$

$$S_1=\sum_{i=0}^{4}x_i=300,\qquad f_1=\sum_{i=0}^{4}y_ix_i=3797$$

$$S_2=\sum_{i=0}^{4}x_i^2=22000$$

得正规方程组

$$\begin{cases}5a_0+300a_1=52.90\\300a_0+22000a_1=3797\end{cases}$$

求解得

$$a_0=\frac{247}{200},\quad a_1=\frac{623}{4000}$$

因此所求的近似公式为

$$g_1(x)=\frac{247}{200}+\frac{623}{4000}x$$

由已知数据用最小二乘法求近似曲线的方法又称为曲线拟合。把所求曲线的方程称为经验公式。由于近似曲线类型很多，我们仅以幂函数曲线作为经验公式的曲线拟合为例，介绍其求解过程。

设已知函数表

t	t_0	t_1	$\cdots$	t_n
Q	Q_0	Q_1	$\cdots$	Q_n

(8.8)

试求其所对应的经验公式（或称数学模型）。

首先按函数表作其直角坐标系的图象，经判别，它是属于幂函数曲线

$$Q=qt^p \tag{8.9}$$

的类型曲线。

其次，对(8.9)两边取以 a 为底的对数*，得

$$\log_a Q=\log_a q+p\log_a t \qquad (8.9)_1$$

引入记号

$$y=\log_a Q,\quad a_0=\log_a q,\quad a_1=p,\quad x=\log_a t \tag{8.10}$$

则$(8.9)_1$ 可写成

$$y=a_0+a_1x \tag{8.11}$$

于是，把求曲线方程$Q=qt^p$变成求直线方程 $y=a_0+a_1x$。而此直线方程，可按函数表

x	x_0	x_1	$\cdots$	x_n
y	y_0	y_1	$\cdots$	y_n

$(8.8)_1$

* 一般地，$a=e$或10。

其中

$$y_i = \log_a Q_i, \quad x_i = \log_a t_i$$

求其线性最小平方逼近多项式得到。

最后，将得到的直线方程，变为(8.9)形式，即是所求函数表(8.8)的经验公式。

例12 已知

t	2.2	2.7	3.5	4.1
Q	65	60	53	50

试求其所对应的经验公式。

解 首先按函数表作其图象，知是幂函数曲线．因此，我们按上述办法，来求此经验公式。

设$y=\lg Q$，$x=\lg t$，得新函数表

x	0.3424	0.4314	0.5441	0.6128
y	1.8129	1.7782	1.7243	1.6990

则，$y=a_0+a_1x$，此时，$n=3$，$m=1$，其中 $a_0=\lg q$，$a_1=p$，由（8.4）求出

$$S_0=\sum_{i=0}^{3} x_i^0=4$$

$$S_1=\sum_{i=0}^{3} x_i=1.9307, \quad f_0=\sum_{i=0}^{3} y_i=7.0141$$

$$S_2=\sum_{i=0}^{3} x_i^2=0.9748, \quad f_1=\sum_{i=0}^{3} x_i y_i=3.3671$$

代入(8.5)得正规方程组

$$\begin{cases}4a_0+1.9307a_1=7.0144\\1.9307a_0+0.9748a_1=3.3671\end{cases}$$

解出 $a_0=1.963$，$a_1=-0.434$，所以$q=91.9$ ，$p=-434$。

从而得 $Q=91.9t^{-0.434}$。

还应指出，最小二乘法的原理应用很广泛，比如用于解矛

盾方程组。

例13　求矛盾方程组

$$\begin{cases} x+y=3.0 \\ 2x-y=0.2 \\ x+3y=7.0 \\ 3x+y=5.0 \end{cases} \tag{8.11$_1$}$$

的解。

因为无论x、y取什么值，总不能使以上每个方程都恒等。那么，设第i个方程出现的偏差记为u_i。于是(8.11)$_1$改写成

$$u_1=x+y-3.0$$

$$u_2=2x-y-0.2$$

$$u_3=x+3y-7.0$$

$$u_4=3x+y-5.0$$

把使偏差平方和为最小的x、y作为原矛盾方程组的解。

为此，设偏差平方和为$\varphi(x,y)$，则

$$\varphi(x,y)=\sum_{i=1}^{4}u_i^2=(x+y-3.0)^2+(2x-y-0.2)^2+$$

$$+(x+3y-7.0)^2+(3x+y-5.0)^2$$

要使$\varphi(x,y)$为最小。由数学分析知，只要使

$$\frac{\partial\varphi}{\partial x}=2(15x+5y-25.4)=0$$

$$\frac{\partial\varphi}{\partial y}=2(5x+12y-28.8)=0$$

解方程组

$$\begin{cases} 15x+5y=25.4 \\ 5x+12y=28.8 \end{cases} \tag{8.12}$$

得到矛盾方程组的解为

$$x\doteq1.037,\quad y\doteq1.968$$

读者注意，(8.12)与(8.11)$_1$之间的系数、常数项之间有什么关系？读者自己讨论之。

习　　题 7.8

1　已知试验数据

x	0	1	2	3	5
y	1.1	1.9	3.1	3.9	4.9

试用最小二乘法求经验直线$g(x)=a_1x+a_0$。

2　在某个低温过程中，函数y依赖于温度$Q°C$的试验数据如下：

Q	1	2	3	4
y	0.8	1.5	1.8	2.0

而且已知经验公式是

$$g(x)=aQ+bQ^2$$

试用最小二乘法求出a，b。

3　测量一个长度，量n次时，得到n个数值$x_1, x_2, \cdots, x_n$，我们通常取它们的平均值

$$x=\frac{1}{n}(x_1+x_2+\cdots+x_n)$$

作为所求的长度值，为什么？

4　设一发射源的发射强度的公式为

$$I=I_0e^{-\alpha t}$$

而其中I与t是由下列试验数据

t	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8
I	3.16	2.38	1.75	1.34	1.00	0.74	0.56

确定。求I_0及α。

5　求矛盾方程组

$$\begin{cases}x_1-15.5=0\\ x_2-6.1=0\\ x_1+x_2-20.9=0\end{cases}$$

的解。

§9 正交多项式

为了讨论连续情况的平方逼近，在本节介绍正交多项式的概念及两个常用的正交多项式。

(一) 一般概念

定义1 设 $f(x)$，$g(x)$为两个非零多项式，$\rho(x)$为在$[a,b]$上不恒为零的非负连续函数，如果它们满足下列条件

$$(f(x),g(x))=0$$

则称$f(x)$与$g(x)$在$[a,b]$上是带权正交的，其中

$$(f(x),\ g(x))=\int_a^b \rho(x)f(x)g(x)dx$$

而$\rho(x)$称为权函数。

定义2 设 $\{\varphi_k(x)\}(k=0,1,2,\cdots)$ 为多项式序列，其中$\varphi_k(x)$为k次多项式，如果它们满足下列条件

$$(\varphi_j,\ \varphi_k)=\begin{cases}0 & j\neq k\\ \sigma_j & j=k\end{cases} \tag{9.1}$$

则称$\{\varphi_k(x)\}$为在$[a,b]$上带权$\rho(x)$的正交多项式序列。称$\varphi_k(x)$为在$[a,b]$上带权$\rho(x)$的K次多项式，简称K次正交多项式。

设$\varphi_k(x)$的首项系数为A_k，则记

$$\bar{\varphi}_k(x)=\frac{\varphi_k(x)}{A_k}$$

为首项系数为1的K次带权$\rho(x)$的正交多项式。

再设

$$\hat{\varphi}_k(x)=\frac{1}{\sqrt{\sigma_k}}\varphi_k(x)$$

称它为K次带权$\rho(x)$的标准正交多项式。它们相应的序列

$\{\overline{\varphi}_k(x)\}$，$\{\hat{\varphi}_k(x)\}$分别简称为首项系数为1的正交多项式序列及标准正交多项式序列。

正交多项式序列有下列性质：

定理1 任何一个n次多项式$f_n(x)$都可用正交多项式组$\varphi_0(x)$，$\varphi_1(x)$，…，$\varphi_n(x)$线性表出：

$$f_n(x)=C_0\varphi_0(x)+C_1\varphi_1(x)+\cdots+C_n\varphi_n(x) \tag{9.2}$$

其中

$$C_k=\frac{1}{\sigma_k}\int_a^b\rho(x)f_n(x)\varphi_k(x)dx=\frac{1}{\sigma_k}(f_n,\varphi_k) \tag{9.3}$$

$$k=0,1,\cdots,n.$$

证明 对式(9.2)两端乘以$\rho(x)\varphi_k(x)$，再求从a到b的积分并考虑到$\varphi_k(x)$的正交性(9.1)，则

$$\int_a^b\rho(x)f_n(x)\varphi_k(x)\,dx=C_k\int_a^b\rho(x)\varphi_k(x)\varphi_k(x)dx$$
$$=C_k\sigma_k$$

从而便得(9.3)证完。

定理2 设$\{\varphi_n(x)\}$为在$[a,b]$上带权$\rho(x)$的正交多项式序列，则任一低于n次的多项式$Q(x)$都与$\varphi_n(x)$带权正交。

证明 只要证

$$\int_a^b\rho(x)Q(x)\varphi_k(x)dx=0 \tag{9.4}$$

成立就可。

由定理1知

$$Q(x)=C_0\varphi_0(x)+C_1\varphi_1(x)+\cdots+C_{i-1}\varphi_{i-1}(x)$$

对上式两端乘以$\rho(x)\varphi_n(x)$，再求从a到b的积分，且注意$\{\varphi_n(x)\}$的正交性，则得(9.4)，证完。

定理3 设$\{\overline{\varphi}_n(x)\}$是首项系数等于1的在$[a,b]$上带权$\rho(x)$正交多项式序列．则存在常数$C_n$，$C_{n-1}$使得序列中相邻的三项有下列递推关系

$$\overline{\varphi}_{n+1}(x)=(x-C_n)\overline{\varphi}_n(x)-c_{n-1}\overline{\varphi}_{n-1}(x) \tag{9.5}$$

$$(n=1,2,\cdots)$$

其中

$$C_{n-1}=\frac{(\overline{\varphi_n},\overline{\varphi_n})}{(\overline{\varphi_{n-1}},\overline{\varphi_{n-1}})},\qquad C_n=\frac{(x\overline{\varphi_n},\ \overline{\varphi_n})}{(\overline{\varphi_n},\ \overline{\varphi_n})}\qquad (9.5)_1$$

证明 为简明起见，记$\overline{\varphi_k}=\overline{\varphi_k}(x)$，$\rho=\rho(x)$，由于$x\overline{\varphi_n}$为$n+1$次多项式，由定理1知，它可线性表示为

$$x\overline{\varphi_n}=\overline{\varphi_{n+1}}+C_n\overline{\varphi_n}+C_{n-1}\overline{\varphi_{n-1}}+C_{n-2}\overline{\varphi_{n-2}}+\cdots+C_0\overline{\varphi_0}\qquad (A)$$

以 $\rho\overline{\varphi_k}$乘上式两端，并取从a到b的积分，则有

$$(x\overline{\varphi_n},\overline{\varphi_k})=C_k(\overline{\varphi_k},\ \overline{\varphi_k})\qquad (9.3)_1$$

其中 $k=0,1,2,\cdots,n$。

当$k\leqslant n-2$时，$x\overline{\varphi_k}$的次数$<n$ 。注意到定理2，上式左端为

$$(x\overline{\varphi_n},\ \overline{\varphi_k})=(\overline{\varphi_n},\ x\overline{\varphi_k})=0\qquad (k+1<n)$$

从而在$(9.3)_1$中必有$C_0=C_1=\cdots=C_{n-2}=0$。剩下的，有

$$C_n=\frac{(x\overline{\varphi_n},\overline{\varphi_n})}{(\overline{\varphi_n},\overline{\varphi_n})}\qquad (9.5)_2$$

$$C_{n-1}=\frac{(x\overline{\varphi_n},\ \overline{\varphi_{n-1}})}{(\overline{\varphi_{n-1}},\overline{\varphi_{n-1}})}=\frac{(\overline{\varphi_n},\ \overline{\varphi_n})}{(\overline{\varphi_{n-1}},\ \overline{\varphi_{n-1}})}$$

其中（读者不难证明）

$$(x\overline{\varphi_n},\ \overline{\varphi_{n-1}})=(\overline{\varphi_n},x\overline{\varphi_{n-1}})=(\overline{\varphi_n},\overline{\varphi_n})$$

C_n,C_{n-1}存在，将C_k代入(A)中整理，便得定理所要结论。证完。

定理4 n次($n\geqslant1$)正交多项式$\varphi_n(x)$在(a,b)内有n个互异实根。

证明 1° $\varphi_n(x)$在(a,b)内一定有根。否则$\varphi_n(x)$在(a,b)上不变号，从而必有

$$\int_a^b \rho(x)\varphi_n(x)dx = \int_a^b \rho(x)\varphi_n(x)\varphi_0(x)dx \neq 0$$

这与$\varphi_n(x)$、$\varphi_0(x)$正交性矛盾。

2° $\varphi_n(x)$在$[a, b]$内无重根．否则若$x_1 \in [a, b]$是$\varphi_n(x)$的二重根，则$Q(x) = \varphi_n(x)/(x-x_1)^2$是$n-2$次多项式，由定理2，有

$$0 = \int_a^b \rho(x)Q(x)\varphi_n(x)dx = \int_a^b \rho(x)\left[\frac{\varphi_n(x)}{x-x_1}\right]^2 dx$$

这是不可能的，因右端>0。

3° $\varphi_n(x)$在(a, b)内必有n个根，否则如果$\varphi_n(x)$在$[a, b]$内只有$k(<n)$个根$x_1, x_2, \cdots, x_k$．设

$$Q(x) = (x-x_1)\cdots(x-x_k)$$
$$\varphi_n(x) = q(x)Q(x)$$

$q(x)$在$[a, b]$内无根，不变号，所以

$$\int_a^b \rho(x)Q(x)\varphi_n(x)dx = \int_a^b \rho(x)q(x)Q^2(x)dx$$

由定理2，此等式左端$=0$，但右端$\neq 0$，矛盾，从而必有$k=n$．证完。

下面介绍两个具体的正交多项式序列。

（二）切比雪夫多项式

在三角学里大家知道，$\cos n\theta$可以写成$\cos\theta$的n次多项式的形式：

$$\cos n\theta = 2^{n-1}\cos^n\theta + a_{n-1}\cos^{n-1}\theta + \cdots + a_1\cos\theta + a_0 \tag{9.6}$$

其中$a_{n-1}, \cdots, a_0$为常数。

令$\cos\theta = x$，$x \in [-1, 1]$，则$\theta = \arccos x$，$\theta \in [0, \pi]$于是上式可写为

$$\cos(n\arccos x) = 2^{n-1}x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \cdots + a_0 \quad (9.6)_1$$

把$(9.6)_1$的n次多项式称为n次切比雪夫多项式，记为$T_n(x)$，

显然

$$T_n(x)=\cos(n\arccos x) \qquad -1\leqslant x\leqslant 1 \qquad (9.6)_2$$

$$=\cos n\theta \qquad 0\leqslant\theta\leqslant\pi \qquad (9.6)_3$$

$T_n(x)$有下列重要性质

（1）由$T_n(x)$所组成的序列$\{T_n(x)\}$是在区间$[-1,1]$上带权 $\rho(x)=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 正交多项式序列。

事实上，只要验证 $\{T_n(x)\}$ 满足定义 2 就行。即，令$\varphi_k(x)=T_k(x)$代入积分(9.1)得

$$(T_j,T_k)=\int_{-1}^{1}\frac{T_j(x)T_k(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx$$

引入变量替换$x=\cos\theta$，则

$$(T_jT_k)=\int_0^{\pi}\cos j\theta\cos k\theta d\theta$$

$$=\begin{cases}0 & j\neq k\\ \pi & j=k=0\\ \pi/2 & j=k\neq 0\end{cases} \qquad (9.7)$$

确实满足定义2。故 $\{T_n(x)\}$ 是在 $[-1,1]$ 上带权 $\rho(x)=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$的正交多项式序列。

（2）$\{T_n(x)\}$必具有正交多项式序列的共性：

1° 任何已知n次多项式 $f_n(x)$ 都可用

$T_0(x)$，$T_1(x)$，…，$T_n(x)$

线性表出，即

$$f_n(x)=C_0T_0(x)+C_1T_1(x)+\cdots+C_nT_n(x) \qquad (9.8)$$

其中

$$C_0=\frac{1}{\pi}\int_{-1}^{1}\frac{f_n(x)T_0(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx$$

$$C_k=\frac{2}{\pi}\int_{-1}^{1}\frac{f_n(x)T_k(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx \quad (k=1,2,\cdots,n)$$

显然，它可由定理 1 直接推得。

2° $T_n(x)$与任一低于 n 次多项式 $Q(x)$ 在$[-1,1]$上带权 $\rho(x)=\dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$正交的。

此性质也是显然成立的。

3° 相邻的三个切比雪夫多项式有如下递推关系式

$$T_{n+1}(x)=2xT_n(x)-T_{n-1}(x) \quad (n=1,2,\cdots) \quad (9.9)$$

其中 $T_0(x)=1$，$T_1(x)=x$。

上式可由定理 3 推出。我们这里介绍更简单的推导办法如下：注意(9.6)；

$$\begin{aligned}T_{n+1}(x)+T_{n-1}&=\cos(n+1)\theta+\cos(n-1)\theta\\&=2\cos n\theta\cos\theta\\&=2T_n(x)\cdot x\end{aligned}$$

从而得(9.9)。

利用 (9.9)可以依次写出各次的切比雪夫多项式。下面我们仅列出前 5 次切比雪夫多项式：

$$\begin{aligned}&T_0(x)=1\\&T_1(x)=x\\&T_2(x)=2x^2-1\\&T_3(x)=4x^3-3x\\&T_4(x)=8x^4-8x^2+1\\&T_5(x)=16x^5-20x^3+5x\end{aligned} \quad (9.10)$$

反之，利用(9.10)，而不用(9.8)，马上可推出 $\{x^k\}$ 可用 $\{T_k(x)\}$线性表出的关系式：

$$x^0=1=T_0$$

$$x=T_1$$

$$x^2=\frac{1}{2}(T_0+T_2)$$

$$x^3=\frac{1}{4}(3T_1+T_3)$$

$$x^4=\frac{1}{8}(3T_0+4T_2+T_4)$$

$$x^5=\frac{1}{16}(10T_1+5T_3+T_5)$$

4° $T_n(x)$在$[-1,1]$有n个互异实根，其根为

$$x_k=\cos\frac{2k-1}{2n}\pi \qquad (k=1,2,\cdots,n) \tag{9.11}$$

事实上，由定理4，知$T_n(x)$在$[-1,1]$内有n个互异实根。又

$$T_n(x)=\cos n\theta=0$$

即从

$$n\theta=k\pi-\frac{\pi}{2}$$

有

$$\theta=\frac{2k-1}{2n}\pi \qquad (k=1,2,\cdots,n)$$

记作

$$\theta_k=\frac{2k-1}{2n}\pi$$

于是 $$x_k=\cos\frac{2k-1}{2n}\pi \qquad (k=1,2,\cdots,n)$$

(3) $\{T_n(x)\}$具有以下特性：

1° $T_n(x)$的首项系数等于2^{n-1}。

2° $T_n(-x)=(-1)^nT_n(x)$。

3° 在$[-1,1]$上$|T_n(x)|\leqslant 1$。

4° $T_n(x)$在$[-1,1]$上有$n+1$个极值点

$$\overline{x_k}=\cos\frac{k\pi}{n} \qquad (k=0,1,n)\cdots,$$

且

$$T_n(\overline{x_k})=(-1)^k$$

5° 在$[-1,1]$上一切首项系数为1的n次多项式中，函

数值的最大绝对值为最小的多项式是 $\overline{T_n}(x)$，其中

$$\overline{T_n}(x)=\frac{T_n(x)}{2^{n-1}}.$$

还有其它性质就不一一列举了。前三个性质是显然的，读者自证之。我们主要证实4°，5°。

先证性质4°：

$$T_n(x)=\cos n\theta$$

而在$n\theta=k\pi(k=0,1,2\cdots,n)$上达到极值±1即

$$\theta=\frac{k\pi}{n}$$

记作

$$\theta_k=\frac{k\pi}{n}\qquad(k=0,1,2,\cdots,n)$$

于是 $\overline{x_k}=\cos\theta_k=\cos\frac{k\pi}{n}\qquad(k=0,1,2,\cdots,n)$

且 $T_n(\overline{x_k})=(-1)^k$

注意，此性质说明，$T_n(x)$在$[-1,1]$中有 $n+1$个点 $\overline{x_k}$ $(k=0,1,\cdots,n)$使其函数值轮流达到最大值 1 和最小值 -1。我们称这$n+1$个点为交错点组。这是切比雪夫多项式的一个重要性质。其几何意义见图(4.9)。

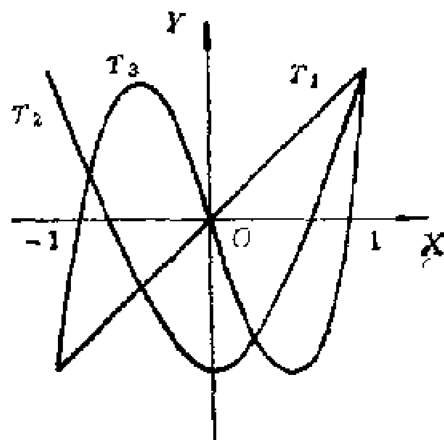


图 4.9

证明性质 5°。设$\overline{f_n}(x)$为任意一个首项系数为 1 的n次多项式，只要证有下述不等式

$$\max_{-1\leqslant x\leqslant 1}|\overline{T_n}(x)|\leqslant\max_{-1\leqslant x\leqslant 1}|\overline{f_n}(x)|\tag{9.12}$$

成立即可。

用反证法．假设(9.12)不成立，而存在一个$\overline{f_n}(x)\neq\overline{T_n}(x)$，有

$$\max_{-1\leq x\leq 1}|\overline{f_n}(x)| < \max_{-1\leq x\leq 1}|\overline{T_n}(x)| = \frac{1}{2^{n-1}} \qquad (9.13)$$

那么，差$\overline{T_n}(x)-\overline{f_n}(x)$至多为$n-1$次多项式．且记为

$$h_{n-1}=\overline{T_n}(x)-\overline{f_n}(x)$$

则在交错点组上依据(9.13)有以下事实：

$$h_{n-1}(\overline{x_0})=\overline{T_n}(\overline{x_0})-\overline{f_n}(\overline{x_0})=\frac{1}{2_{n-1}}-\overline{f_n}(\overline{x_0})>0$$

$$h_{n-1}(\overline{x_1})=-\frac{1}{2^{n-1}}-\overline{f_n}(\overline{x_1})<0$$

$$\cdots \qquad \cdots \qquad \cdots$$

$$h_{n-1}(\overline{x_n})=(-1)^n\frac{1}{2^{n-1}}-f_n(\overline{x_n})\begin{cases}>0 & n\text{为偶数}\\ <0 & n\text{为奇数}\end{cases}$$

即$h_{n-1}(x)$在〔$-1,1$〕内的$n+1$个点$\overline{x_0},\overline{x_1},\cdots,\overline{x_n}$处轮流出现正负号．故由介值定理知，$h_{n-1}(x)$在〔$-1,1$〕内至少有$n$个根，而$h_{n-1}(x)$是$\leq n-1$次多项式．故只有，$h_{n-1}(x)\equiv 0$，但这与假设$h_{n-1}(x)\neq 0$矛盾，因而必有(9.12)成立．

利用切比雪夫多项式的性质(2)1°、(3)5°可降低逼近多项式的次数．

例14，设$|x|\leq 1$，要计算$\sin x$的近似值，使其计算误差不超过0.001首先想到的是对$\sin x$在$x=0$作幂级数展开，取到x^5的项为止，即

$$\sin x\doteq x-\frac{x^3}{3!}+\frac{x^5}{5!}=y(x)$$

此时误差

$$|R_6(x)|\leq\frac{|x|^7}{7!}\leq\frac{1}{7!}<0.001$$

满足要求，但此时是一个五次多项式，如利用切比雪夫多项式序列与$\{x^n\}$之间关系，则有

$$y(x)=x-\frac{x^3}{3!}+\frac{x^5}{5!}$$

$$=T_1-\frac{1}{3!}\left(\frac{1}{4}\right)(3T_1+T_3)+$$

$$+\frac{1}{5!}\left(\frac{1}{16}\right)(10T_1+5T_3+T_5)$$

$$=\left(1-\frac{1}{3!}\cdot\frac{3}{4}+\frac{1}{5!}\cdot\frac{10}{16}\right)T_1+$$

$$+\left(\frac{1}{5!}\cdot\frac{5}{16}-\frac{1}{3!}\cdot\frac{1}{4}\right)T_3+\frac{1}{5!}\cdot\frac{1}{16}T_5$$

$$=\frac{169}{192}T_1-\frac{15}{384}T_3+\frac{1}{1920}T_5$$

因为$|x|\leqslant 1$，所以$|T_5|\leqslant 1$，如舍去最后一项，则

$$\sin x\doteq\frac{169}{192}T_1-\frac{15}{384}T_3$$

如把T_i用x_i代回，得

$$\sin x\doteq\frac{383}{384}x-\frac{5}{32}x^3$$

此时误差为

$$\frac{1}{7!}+\frac{1}{1920}<0.00072$$

也是满足原来误差要求的．但此时是一个三次多项式，比用台劳展开式作近似时次数少二次，从而既减少了计算工作量又达到预定准确度的要求。

（三）勒让德多项式

大家在特殊函数的学习中，已遇到过勒让德多项式，但为了下节的需要，我们从另一个角度引入它。

定义 3 我们把定义在区间$[-1,1]$上，权函数$\rho(x)=1$的正交多项式序列称为**勒让德多项式序列**。记为$\{p_n(x)\}$。即对

任意二个正整数 j，k，且$j\neq k$，有

$$(p_j, p_k)=\int_{-1}^{1} p_j(x)p_k(x)dx=0 \quad (j\neq k) \qquad (9.14)$$

称$p_n(x)$为 n 次勒让德多项式。

我们把首项系数为 1 的n 次勒让德多项式记为$\overline{p}_n(x)$。把$\hat{p}_n(x)$表示为n次标准勒让德多项式。显然

$$(\hat{p}_n(x), \hat{p}_n(x))=\int_{-1}^{1}[\hat{p}_n(x)]^2dx=1$$

显然，勒让德多项式必具有一般正交多项式的共性。即

1° 任何一个 n 次多项式 $f_n(x)$ 都可用勒让德多项式组 $p_0(x)$，$p_1(x),\cdots,p_n(x)$线性表出：

$$f_n(x)=C_0P_0(x)+C_1P_1(x)+\cdots+C_nP_n(x) \qquad (9.15)$$

其中

$$C_k=\frac{1}{\sigma_k}\int_{-1}^{1} f_n(x)p_k(x)dx \qquad (9.15)_1$$

$$\sigma_k=\int_{-1}^{1}[p_k(x)]^2dx$$

2° n 次勒让德多项式 $p_n(x)$ 必与任意一个低于 n 次多项式 $Q(x)$ 正交，即为

$$\int_{-1}^{1} Q(x)p_n(x)dx=0$$

3° 存在三项递推关系式：

$$\overline{P}_{n+1}(x)=x\overline{P}_n(x)-C_{n-1}\overline{P}_{n-1}(x) \qquad (9.16)$$

其中

$$C_{n-1}=\frac{(\overline{p}_n, \overline{p}_n)}{(\overline{p}_{n-1}, \overline{p}_{n-1})}=\frac{\overline{\sigma}_n}{\overline{\sigma}_{n-1}} \qquad (9.16)_1$$

注意，因为

$$(x\overline{p}_n, \overline{p}_n)=\int_{-1}^{1} x(\overline{p}_n(x))^2dx=0$$

所以$C_n=0$

4° n 次勒让德多项式$p_n(x)$在$[-1,1]$内有 n 个互异实根。

虽有以上性质，但是我们关心的是勒让德多项式的具体表示式与一般解析式。

由性质3°，设$\overline{p_0}(x)=1$，$\overline{p_1}(x)=x$，先计算出$\overline{\sigma_0}=(\overline{p_0},\overline{p_0})=2$，$\overline{\sigma_1}=(\overline{p_1},\overline{p_1})=\int_{-1}^{1}x^2dx=\frac{2}{3}$，于是，$C_0=\frac{\overline{\sigma_1}}{\overline{\sigma_0}}=\frac{1}{3}$，从而推得

$$\overline{p_2}=x\overline{p_1}-C_0\overline{p_0}=x^2-\frac{1}{3}$$

同理，可推得

$$\overline{p_3}(x)=\frac{1}{5}(5x^3-3x)$$

$$\overline{p_4}(x)=\frac{1}{35}(35x^4-30x^2+3)$$

$$\overline{p_5}(x)=\frac{1}{63}(63x^5-70x^3+15x)$$

但是$\overline{p_n}(x)$的一般解析式是什么，还是未知的。为此，下面的定理，给出首项系数为1的n次勒让德多项式$\overline{p_n}(x)$的一般表达式。

定理5 首项式系数为1的n次勒让德多项式能唯一地表示成

$$\overline{p_n}(x)=\frac{n!}{(2n)!}\cdot\frac{d^n(x^2-1)^n}{dx^n} \tag{9.17}$$

的形式。

证明 1°先推出(9.17)的结论，2°证唯一性。

1° 设任意一个首项系数为1的 $n-1$ 次多项式，记为$\overline{f_{n-1}}(x)$，对积分

$$(\overline{f_{n-1}},\overline{p_n})=\int_{-1}^{1}\overline{f_{n-1}}(x)\overline{p_n}(x)dx$$

反复用分部积分法，有

$$(\overline{f_{n-1}}, \overline{p_n}) = [\overline{f_{n-1}}(x)u_1(x) - \overline{f'}_{n-1}(x)u_2(x) + \cdots + (-1)^{n-1}\overline{f}_{n-1}^{(n-1)}(x)u_n(x)]_{-1}^{1} \quad (9.18)$$

其中

$$u_1(x) = \int_{-1}^{x} \overline{p_n}(x)dx, u_2(x) = \int_{-1}^{x} u_1(x)dx \cdots$$

$$u_n(x) = \int_{-1}^{x} u_{n-1}(x)dx, \quad u_0(x) = \overline{p_n}(x) \qquad (9.19)$$

又因为$\overline{p_n}(x)$为首项系数为 1 的n次勒让德多项式，由性质 2°知，积分

$$(\overline{f_{n-1}}, \overline{p_n}) = 0$$

从而有

$$[\overline{f_{n-1}}(x)u_1(x) - \overline{f'}_{n-1}(x)u_2(x) + \cdots + (-1)^{n-1}\overline{f}_{n-1}^{(n-1)}(x)u_n(x)]_{-1}^{1} = 0 \quad (9.18)_1$$

从(9.19)知有如下关系式

$$u'_n = u_{n-1}(x), u_n'' = u'_{n-1}(x) = u_{n-2}(x), \cdots$$

$$u_n^{(n-1)}(x) = u_1(x) \text{及} u_n^{(n)}(x) = u_0(x) = \overline{p_n}(x)$$

也就是$u_n(x)$为$2n$次多项式。又从(9.19)得知

$$u_1(-1) = u_2(-1) = \cdots = u_n(-1) = 0$$

即-1是$u_n(x)$的n重零点，从而使$(9.18)_1$ 改写成

$$\overline{f_{n-1}}(1)u_1(1) - \overline{f'}_{n-1}(1)u_2(1) + \cdots + (-1)^{n-1}\overline{f}_{n-1}^{(n-1)}(1)u_n(1) = 0 \qquad (9.18)_2$$

为了求$u_1(1), u_2(1), \cdots, u_n(1)$的值，令$n=1$代入$(9.18)_2$得$\overline{f}_0(1)u_1(1)=0$。因为$\overline{f}_0(x)\equiv 1$，所以$\overline{f}_0(1)=1$，从而推得。$u_1(1)=0$，同理可推得$u_i(1)=0$ $(i=1, 2, \cdots, n-1)$不难证明$u_n(1)$也为零。因为$\overline{f_{n-1}}(x)$为任意首项系数为 1 的$n-1$次多项式，所以，我们可以规定其$x=1$时函数值$\overline{f_{n-1}}(1)\neq 0$。于是，由$(9.18)_2$得

$$(-1)^{n-1}\overline{f}^{(n-1)}(1)u_n(1)=0$$

从而 $u_n(1)=0$. 也就是 1 也是$u_n(x)$的 n 重零点. 因此,

$$u(x)=C_n(x+1)^n(x-1)^n=C_n(x^2-1)^n \qquad (9.20)$$

其中C_n为待定常数. 对上式求 n 次导数得

$$u_n^{(n)}(x)=C_n\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n$$

又因为

$$u_n^{(n)}(x)=\overline{p}_n(x)$$

所以

$$\overline{p}_n(x)=C_n\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n \qquad (9.17)_1$$

而

$$\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n=2n(2n-1)\cdots(n+1)x^n+\cdots$$

$$=\frac{(2n)!}{n!}x^n+\cdots$$

及$\overline{p}_n(x)$的首项系数为 1, 所以

$$C_n=\frac{n!}{(2n)!}$$

从而代入$(9.17)_1$ 推得(9.17).

2° 用反证法. 假定另有一个首项系数为 1 的 n 次多项式$\overline{f}_n(x)$, 且 $\overline{f}_n(x)\neq\overline{p}_n(x)$, 但也满足勒让德多项式的正交条件. 设它们的差

$$Q(x)=\overline{p}_n(x)-\overline{f}_n(x)$$

显然, $Q(x)$为$\leqslant n-1$次多项式. $\overline{p}_n(x)$、 $\overline{f}_n(x)$ 均与 $Q(x)$ 正交, 即

$$\int_{-1}^{1}\overline{p}_n(x)Q(x)\,dx=\int_{-1}^{1}\overline{f}_n(x)Q(x)dx=0$$

于是得如下矛盾现象:

$$0=\int_{-1}^{1}(\overline{p}_n(x)-\overline{f}_n(x))Q(x)dx=\int_{-1}^{1}[Q(x)]^2dx$$

$$\neq 0$$

故假设不成立。证完。

依上结论，可推得如下特性：

1° $$(\overline{p}_n,\ \overline{p}_n)=\frac{2}{2n+1}[(2n)!!]^2\left(\frac{n!}{(2n)!}\right)^2 \quad (9.21)$$

（证明见学习指导）记作$\overline{\sigma}_{np}=(\overline{p}_n,\ \overline{p}_n)$。

2° 递推关系式(9.16)变成

$$\overline{p}_{n+1}(x)=x\overline{p}_n(x)-\frac{n^2}{(2n+1)(2n-1)}\overline{p}_{n-1}(x)$$

$$(9.16)_2$$

这样不必再计算$(9.16)_1$，可逐次由$\overline{p_0}(x)=1$，$\overline{p_1}(x)=x$推得$\overline{p_2}(x)$，$\overline{p_3}(x)$，…。

3° 奇偶性 $\overline{p_n}(-x)=(-1)^n\,\overline{p_n}(x)$ (9.22)

相应地，可推得首项系数不为1的勒让德多项式$p_n(x)$及标准勒让德多项式$\hat{p}_n(x)$。

按照定义，我们可写出标准n次勒让德多项式$\hat{p}_n(x)$，即

$$\hat{p}_n(x)=\frac{1}{\sqrt{\overline{\sigma}_{np}}}\overline{p}_n(x)=\sqrt{\frac{2n+1}{2}}\frac{(2n)!}{(2n)!!n!}\overline{p}_n(x)$$

$$=\sqrt{\frac{2n+1}{2}}\cdot\frac{1}{2^n n!}\cdot\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n \quad (9.23)$$

如果，令

$$p_n(x)=\frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n \quad (9.24)$$

则

$$\hat{p}_n(x)=\sqrt{\frac{2n+1}{2}}\,p_n(x) \quad (9.25)$$

从而由定义

$$\hat{p}_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\sigma_n}} p_n(x)$$

知

$$\sigma_n = (p_n, p_n) = \frac{2}{2n+1} \tag{9.26}$$

把(9.24)称为勒让德多项式的罗得立克公式。随之可得 $p_n(x)$ 的性质：

1° $p_n(x)$的首项系数为$\frac{(2n)!}{2^n(n!)^2}$；

$$2° \quad p_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{n+1} x p_n(x) - \frac{n}{n+1} p_{n-1}(x) \tag{9.27}$$

其中 $p_0(x)=1$，$p_1(x)=x$。

习 题 4.9

1 用数学归纳法证明

$\cos n\theta = 2^{n-1}\cos^n\theta + a_{n-1}\cos^{n-1}\theta + \cdots + a_1\cos\theta + a_0$

2 证明$T_n(-x)=(-1)^n T(x)$且 $T_n(x)$ 的系数为正负相间的

3 把$T_n(x)$的定义域$[-1,1]$改为$[a,b]$时，$T_n(x)$ 将变为怎样的？

4 证明 $\int_{-1}^{1} p_n^2(x)dx = \frac{2}{2n+1}$。

5 证明勒让德多项式$p_n(x)$ 的首项系数为 $\frac{(2n)!}{2^n(n!)^2}$

6 证明$p_n(-x)=(-1)^n p_n(x)$。

7 证明任何 n 次多项式都可用$p_0(x), p_1(x), \cdots, p_n(x)$ 线性表出。并求出其线性系数。

8　证明

（1）　$\int_{-1}^{1} x p_n^2(x) dx = 0$；

（2）　$\int_{-1}^{1} x p_k(x) p_n(x) dx = 0$。

其中 $k \leqslant n-2$。提示：（1）只要证明被积函数为奇函数；（2）对$xp_k(x)$用第7题。

9　证明　$xp_n(x) = \frac{n+1}{2n+1} p_{n+1}(x) + \frac{n}{2n+1} p_{n-1}(x)$。

提示：利用第7、8题或用$(9.16)_2$ 来推之。

10　设$|x| \leqslant 1$，要计算$f(x) = e^x$的函数值，试找一个近似多项式$f_n(x)$近似替代它，要求误差不超过0.01同时多项式的次数是最低的.提示：利用切比雪夫多项式的降阶性质。

§10　最小平方逼近

在本节主要讨论连续情形下的最小平方逼近问题，即所给函数不是函数表，而是一个连续函数。

问题的提法是：

设在$[a,b]$上给定连续函数$f(x)$，求m次多项式$g_m(x)$，使得

$$S = \int_a^b [f(x) - g_m(x)]^2 dx$$

为最小。

把$g_m(x)$称为$f(x)$在$[a,b]$上的最小平方逼近。

在更一般地情况下，还可以这样提问题：

设在$[a,b]$上给定连续函数$f(x)$，，求m次多项式$g_m(x)$使

$$S = \int_a^b \rho(x)(f(x) - g_m(x))^2 dx \tag{10.1}$$

为最小，其中$\rho(x)$为权函数。

把$g_m(x)$称为 $f(x)$在$[a,b]$上的带权最小平方逼近。

如何求$g_m(x)$呢？用待定系数法。

如果设$g_m(x)$为通常的多项式：

$$g_m(x)=a_0+a_1x+\cdots+a_mx^m$$

那末，还得象在最小二乘法里那样，先建立正规方程组，解它求出a_0，a_1，…，a_m，但是现在我们已学过正交多项式，利用正交多项式可以表出$g_m(x)$，并利用正交多项式的正交性，直接算出诸系数，而不用解线性方程组了。

设$\{\varphi_n(x)\}$是正交多项式序列，则由§4.9定理1

$$g_m(x)=C_0\varphi_0(x)+C_1\varphi_1(x)+\cdots+C_m\varphi_m(x)$$

$$=\sum_{j=0}^{m}C_j\varphi_j(x) \tag{10.2}$$

现在的问题是求C_0，C_1，…，C_m使(10.1)为最小值。显然，S为C_0，C_1，…，C_m的函数，由数学分析知，$C_j(j=0,1,2,\cdots,m)$可从下列方程组

$$\frac{\partial S}{\partial C_j}=0 \qquad (j=0,1,2,\cdots,m) \tag{10.3}$$

中解得。

为此，对任意k，且注意$\varphi_k(x)$的正交性，

$$\frac{\partial S}{\partial C_k}=\frac{\partial}{\partial C_k}\int_a^b\rho(x)\Big[f(x)-\sum_{j=0}^{m}C_j\varphi_j(x)\Big]^2dx$$

$$=2\int_a^b\rho(x)\Big[f(x)-\sum_{j=0}^{m}C_j\varphi_j(x)\Big]\varphi_k(x)dx$$

$$=2\Big(\int_a^b\rho(x)f(x)\varphi_k(x)dx-$$

$$-C_k\int_a^b\rho(x)\varphi_k^2(x)dx\Big)$$

$$=0 \tag{10.4}$$

从而

$$C_k=\frac{\int_a^b \rho(x)f(x)\varphi_k(x)dx}{\int_a^b \rho(x)\varphi_k^2(x)dx}=\frac{(f,\varphi_k)}{(\varphi_k,\ \varphi_k)} \qquad (10.5)$$

$$k=0,1,\cdots,m$$

把C_k代入(10.2)中，就得到$g_m(x)$。

此时仅需要计算 $2(m+1)$个定积分值及 $m+1$ 次除法，确实简化了计算过程。

同最小二乘法一样，还要说明，所求的 $g_m(x)$ 确实满足(10.1)要求的。或者说，不存在另外的m次多项式$\overline{g}_m(x)$ 比$g_m(x)$,更逼近于$f(x)$。

定理1 若设 $g_m(x)$ 是由(10.5)确定的，$\overline{g}_m(x)$ 是任意m次多项式，且，$\overline{g}_m(x)\neq g_m(x)$，则必有不等式

$$\int_a^b \rho(x)[f(x)-g_m(x)]^2\,dx<\int_a^b \rho(x)(f(x)-\overline{g}_m(x))^2dx$$

成立。

证明 由§4.9定理1，设

$$\overline{g}_m(x)=\sum_{j=0}^m \overline{C}_j\varphi_j(x)$$

则

$$g_m(x)-\overline{g}_m(x)=\sum_{j=0}^m (C_j-\overline{C}_j)\varphi_j(x)$$

为简单起见，以 f 代替$f(x)$，其它类同。于是

$$\int_a^b \rho(f-\overline{g}_m)d\,x=\int_a^b \rho(f-g_m+g_m-\overline{g}_m)^2dx$$

$$=\int_a^b \rho(f-g_m)^2dx+2\int_a^b \rho(f-g_m)(g_m-\overline{g}_m)dx$$

$$+\int_a^b \rho(g_m-\overline{g}_m)^2dx$$

注意上式右边第二项可改写为

$$2\int_a^b \rho(f-g_m)\sum_{j=0}^{m}(C_j-\overline{C_j})\varphi_j dx$$

$$=2\cdot\sum_{j=0}^{m}(C_j-\overline{C_j})\cdot\int_a^b \rho(f-g_m)\varphi_j dx$$

$$=0$$

且上式右边第三项>0，从而有

$$\int_a^b \rho(f-\overline{g_m})^2 dx>\int_a^b \rho(f-g_m)^2 dx$$

证完。

定理2 满足(10.1)的$g_m(x)$是唯一的。

证明 假定另外有$\overline{g_m}(x)$，且$\overline{g_m}(x)\neq g_m(x)$，也满足(10.1)。则差

$$g_m-\overline{g_m}=\sum_{j=0}^{m}C_j\varphi_j$$

其中C_j不全为零。从

$$\int_a^b \rho(g_m-\overline{g_m})\varphi_k dx=\int_a^b \rho(f-\overline{g_m}-(f-g_m))\varphi_k dx$$

$$=\int_a^b \rho(f-\overline{g_m})\varphi_k dx-\int_a^b \rho(f-g_m)\varphi_k dx=0$$

而它也可写为

$$\int_a^b \rho(g_m-\overline{g_m})\varphi_k dx=\int_a^b \rho\Big(\sum_{j=0}^{m}C_j\varphi_j\Big)\varphi_k dx$$

$$=\sum_{j=0}^{m}\Big\{C_j\int_a^b \rho\varphi_j\varphi_k dx\Big\}=C_k\int_a^b \rho\varphi_k^2 dx$$

因为

$$\int_a^b \rho\varphi_k^2 dx\neq 0$$

所以，只有$C_k=0(k=0,1,\cdots,m)$。这与假设矛盾，故原结论正确，只有唯一的$g_m(x)$满足(10.1)。

例15 试构造$f(x)=e^x$在$[-1,1]$上最小平方逼近线性多项式。

解　首先选 $\{\varphi_i(x)\}$，因为在$[-1,1]$上，取勒让德多项式序列$\{p_n(x)\}$，则此线性多项式记成

$$g_1(x)=a_0p_0(x)+a_1p_1(x)$$

其中　$p_0(x)=1, p_1(x)=x$。

由(10.5) 分别求出

$$a_0=\frac{(f,\ p_0)}{(p_0,p_0)}=\frac{1}{2}\int_{-1}^{1}e^x dx=sh(1)\doteq 1.1752$$

$$a_1=\frac{(f,\ p_1)}{(p_1,p_1)}=\frac{3}{2}\int_{-1}^{1}xe^x dx=3e^{-1}\doteq 1.1036$$

即

$$g_1(x)=1.1752+1.1036x$$

最后，离散情况也有类似结论，就不再重复讨论了。

习　　题 4.10

1　试构造$f(x)=\sin x$在$[-1,1]$上的最小平方逼近的三次多项式。

2　试构造$f(x)=x^4$在$[-1,1]$上的最小平方逼近的二次多项式。

第五章 数值积分

§1 引 言

我们熟知，若函数 $f(x)$ 在区间$[a, b]$上连续且其原函数为 $F(x)$，则可用牛顿—莱布尼兹公式

$$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a) \tag{1.1}$$

求得定积分．此公式无论在理论上或在解决实际问题上都起了很大的作用．但有些被积函数找不到用初等函数的有限形式表示的原函数．例如，对于

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx \quad 和 \quad \int_0^1 e^{-x^2} dx$$

该公式就无能为力了；还有的被积函数尽管能用初等函数的有限形式表示出来，但表示式太复杂，也不便使用．特别在实际问题中还有很多函数是用表格或图形表示的，对这种函数积分，公式（1.1）就更失去作用了．这就说明通过求原函数计算积分有它的局限性．所以研究关于它们的数值方法——数值积分就是很必要的了．这种方法也是微分方程、积分方程数值解法的基础．那么怎样实现定积分的数值计算呢？

分析$\int_a^b f(x)dx$ 我们发现，产生困难的原因在于 $f(x)$的特殊．为此对 $f(x)$ 若能找到简单的近似函数 $y(x)$ 来代替，那么计算$\int_a^b y(x)dx$就变为简单的了．因此定积分的近似计算，实

质上就是被积函数的近似计算问题。第四章介绍的那几种构造$f(x)$的近似多项式的方法，也就完全可以用来解决定积分的计算问题。

本章重点将从插值角度作被积函数的近似式并导出若干常用的数值积分公式。

§2 内插求积公式

内插求积公式的基本思想是，根据已给的一些离散点的值，构造一个插值多项式 $y_n(x)$ 代替被积函数 $f(x)$，然后用 $\int_a^b y_n(x)dx$ 代替 $\int_a^b f(x)dx$。这样得到的求积公式称为内插求积公式。

例如，对于

$$I=\int_0^1 f(x)\,dx \tag{2.1}$$

若取节点为

$$x_0=\frac{1}{4},\qquad x_1=\frac{1}{2},\qquad x_2=\frac{3}{4}$$

则 $f(x)$的插值多项式为

$$L_2(x)=\frac{\left(x-\frac{1}{2}\right)\left(x-\frac{3}{4}\right)}{\left(\frac{1}{4}-\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{4}-\frac{3}{4}\right)}y_0+$$

$$+\frac{\left(x-\frac{1}{4}\right)\left(x-\frac{3}{4}\right)}{\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{4}\right)\left(\frac{1}{2}-\frac{3}{4}\right)}y_1+$$

$$+\frac{\left(x-\frac{1}{4}\right)\left(x-\frac{1}{2}\right)}{\left(\frac{3}{4}-\frac{1}{4}\right)\left(\frac{3}{4}-\frac{1}{2}\right)}y_2$$

以这个 $L_2(x)$替代（2，1）中的 $f(x)$，得：

$$\int_0^1 f(x)\,dx \doteq \int_0^1 L_2(x)\,dx$$

$$= \left[\int_0^1 \frac{\left(x-\frac{1}{2}\right)\left(x-\frac{3}{4}\right)}{\left(\frac{1}{4}-\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{4}-\frac{3}{4}\right)}dx\right] y_0 +$$

$$+\left[\int_0^1 \frac{\left(x-\frac{1}{4}\right)\left(x-\frac{3}{4}\right)}{\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{4}\right)\left(\frac{1}{2}-\frac{3}{4}\right)}dx\right] y_1 +$$

$$+\left[\int_0^1 \frac{\left(x-\frac{1}{4}\right)\left(x-\frac{1}{2}\right)}{\left(\frac{3}{4}-\frac{1}{4}\right)\left(\frac{3}{4}-\frac{1}{2}\right)}dx\right] y_2$$

$$= \frac{2}{3}y_0 - \frac{1}{3}y_1 + \frac{2}{3}y_2$$

这样，就得到计算（2.1）的一种数值积分公式：

$$\int_0^1 f(x)dx \doteq \frac{1}{3}\left[2f\left(\frac{1}{4}\right)-f\left(\frac{1}{2}\right)+2f\left(\frac{3}{4}\right)\right] \quad (2.2)$$

例如，用（2.2）计算积分

$$I = \int_0^1 e^{-2x}\,dx$$

则有

$$I = \int_0^1 e^{-2x}dx \doteq \frac{1}{3}\left(2e^{-2\times\frac{1}{4}} - e^{-2\times\frac{1}{2}} + 2e^{-2\times\frac{3}{4}}\right)$$

$$= \frac{1}{3}\left(2e^{-\frac{1}{2}} - e^{-1} + 2e^{-\frac{3}{2}}\right)$$

$$= \frac{1}{3}(2\times 0.60653 - 0.36788 + 2\times 0.22313)$$

$$= 0.43048$$

事实上，$\int_0^1 e^{-2x}dx$ 的精确到10^{-5} 位的值是0.43233，故

0.43048的误差为 0.000185。

对于一般的

$$I=\int_a^b f(x)\,dx \tag{2.3}$$

可在 $[a,b]$ 上任选 $n+1$ 个互不相同的节点$x_0,x_1,\cdots,x_n$ 作出 $f(x)$的拉格朗日插值公式

$$f(x)=\sum_{k=0}^{n}\frac{\omega(x)}{(x-x_k)\omega'(x_k)}f(x_k)+R_n(f,x) \tag{2.4}$$

其中

$$\omega(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots\cdots(x-x_n)$$

$$R_n(f,x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x),\quad a<\xi<b \tag{2.4$_1$}$$

以（2.4）的右端代入（2.3）中得：

$$\int_a^b f(x)\,dx=\sum_{k=0}^{n}\left[\int_a^b\frac{\omega(x)}{(x-x_k)\,\omega'(x_k)}dx\right]f(x_k)+$$

$$+\int_a^b R_n(f,x)dx$$

即

$$\int_a^b f(x)\,dx=\sum_{k=0}^{n}A_k f(x_k)+R_n(f) \tag{2.5}$$

其中

$$A_k=\int_a^b\frac{\omega(x)}{(x-x_k)\,\omega'(x_k)}dx \tag{2.6}$$

$$R_n(f)=\int_a^b R_n(f,x)dx \tag{2.7}$$

在（2.5）中略去 $R_n(f)$ 就得到

$$\int_a^b f(x)dx\doteq\sum_{k=0}^{n}A_k f(x_k) \tag{2.8}$$

通常把用（2.6）计算系数的这个公式（2.5）称为内插求积公

式，A_k称为系数，$R_n(f)$就是这个公式的误差，也称为余项。

设 $M_{n+1}=\max\limits_{\xi\in[a,b]}|f^{(n+1)}(\xi)|$ 存在，则 $R_n(f)$ 有下述估计式：

$$|R_n(f)|\leqslant\frac{M_{n+1}}{(n+1)!}\int_a^b|\omega(x)|dx$$

使用(2.8)时，从形式上看需按(2.6)计算A_k，因此还是要计算积分。不过这时我们已经把一个复杂的积分转化为计算多项式的积分了。这是易于计算的，从(2.6)式不难发现，对于确定的区间$[a,b]$，系数A_k只与求积区间$[a,b]$及取定的节点有关与被积函数$f(x)$无关。于是A_k可以事先算好作成系数表不必临时计算，这就使得这个公式在实用时比较简便。特别是内插求积公式(2.8)的系数和等于$b-a$：

$$A_0+A_1+\cdots\cdots+A_n=b-a$$

此式可用来检验计算系数的正确性。

为了衡量求积公式的精确程度，一般是通过余项$R(f)$的大小来衡量，但是引进代数精确度的概念，讨论起来将更为方便些。于是下面给出关于代数精确度的概念。

定义 若一个求积公式对于$f(x)=x^k$ $(k=0,1,\cdots,n)$都变成精确等式，而对于$f(x)=x^{n+1}$就不精确成立，则称这个求积公式具有n次代数精确度

一般来讲，代数精确度愈高的求积公式越精确。

定理 $n+1$个节点的求积公式是内插求积公式的充要条件是，它对于不高于n次多项式成为精确等式，即它至少有n次代数精确度。

证明 设有某求积公式为

$$\int_a^b f(x)dx\doteq\sum_{k=0}^{n}\overline{A_k}f(x_k) \tag{2.9}$$

首先证明必要性：如果(2.9)为内插求积公式，即

$\overline{A}_k = A_k$，则当 $f(x)$ 为不高于 n 次的多项式时，必有$f^{(n+1)}(x) \equiv 0$。所以 $R_n(f,x) = 0$，于是由(2.7)知 $R_n(f) = 0$。则由 (2.5) 得

$$\int_a^b f(x)\,dx \equiv \sum_{k=0}^{n} \overline{A}_k f(x_k) \tag{2.10}$$

其次证明充分性：如果(2.9)对任何次数($\leqslant n$)的多项式有精确等式 (2.10) 成立，则 (2.9) 必定是内插求积公式，即 $\overline{A}_k = A_k$。

事实上，任取 $m(\leqslant n)$次多项式 $f_m(x)$，把它改写为拉格朗日内插多项式的形式：

$$f_m(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{\omega(x)}{(x-x_k)\,\omega'(x_k)} f_m(x_k)$$

将它代入 (2.10)，得

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_a^b f_m(x)\,dx =$$

$$= \sum_{k=0}^{n} \int_a^b \frac{\omega(x)}{(x-x_k)\,\omega'(x_k)}\,dx\ f_m(x_k)$$

$$\equiv \sum_{k=0}^{n} \overline{A}_k\ f_m(x_k)$$

故有

$$\sum_{k=0}^{n}\left[\overline{A}_k - \int_a^b \frac{\omega(x)}{(x-x_k)\omega'(x_k)}dx\right] f_m(x_k) = 0$$

但由于 $f_m(x)$取法的任意性，故可设

$$f_m(x_k) = \begin{cases} 1 & m = k \\ 0 & m \neq k \end{cases}$$

从而得

$$\overline{A}_k = \int_a^b \frac{\omega(x)}{(x-x_k)\omega'(x_k)}dx = A_k$$

此结果说明 $n+1$ 个节点的求积公式(2.9) 为内插求积公式。证完。

定理只表明 $n+1$ 个节点的内插求积公式的代数精确度至少是 n 次的。但它并没证明就是 n 次的，也就是说可能高于 n 次。

例如，本节开头举的例子(2.2)，它有3个节点，读者不难验证它具有 3 次代数精确度。

习　　题　5·2

1　求下列求积公式的代数精确度，并用它计算定积分，验证此求积公式为内插求积公式。

$$\int_0^1 f(x)dx \doteq \frac{1}{3}\left[2f\left(\frac{1}{4}\right)-f\left(\frac{1}{2}\right)+2f\left(\frac{3}{4}\right)\right]$$

$$\int_0^1 x^2\,dx$$

2　在区间 $[-1,1]$ 上，取 $x_1=-1$，$x_2=0$，$x_3=1$ 构造内插求积公式，并求它的代数精确度。

3　求三个不同的节点，x_1，x_2，x_3，使求积公式

$$\int_{-1}^1 f(x)\,dx = C[f(x_1)+f(x_2)+f(x_3)]$$

具有 3 次代数精确度。

4　导出矩形公式

$$\int_a^b f(x)dx \doteq (b-a)f(a) \qquad \text{(左矩形求积公式)}$$

$$\int_a^b f(x)dx \doteq (b-a)f(b) \qquad \text{(右矩形求积公式)}$$

及其余项，再给出矩形公式的几何解释。

5　证明　$A_0+A_1+\cdots\cdots+A_n=b-a$

§3 等距节点求积公式

前一节我们讲的是一般情况下的内插求积公式，本节将讨论其一种特殊情况，即取等距节点时的内插求积公式。特别是我们要讨论两个简单的具体公式——梯形公式、辛卜生公式及其在立体几何上的应用。

（一）牛顿-柯特斯公式

当取节点为等距时，利用(2.6)计算系数

$$A_k=\frac{(-1)^{n-k}h}{k!(n-k)!}\int_0^n t(t-1)\cdots(t-k+1)$$

$$(t-k-1)\cdots\cdots(t-n)dt$$

这是因为令

$$h=\frac{b-a}{n},\quad x-a=ht,\quad x_k=a+kh$$

$$(k=0,\ 1,\ 2,\cdots,n)$$

于是

$$\omega(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots\cdots(x-x_n)$$

$$=h^{n+1}t(t-1)(t-2)\cdots\cdots(t-n)$$

$$\omega'(x_k)=(x_k-x_0)\cdots\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots$$

$$(x_k-x_n)$$

$$=h^nk(k-1)\cdots2\cdot1\cdot(-1)(-2)\cdots\cdots(k-n)$$

$$=(-1)^{n-k}h^nk!(n-k)!$$

$$dx=hdt$$

代入(2.6)则得

$$A_k=\int_0^n\frac{(-1)^{n-k}t(t-1)\cdots(t-n)}{(t-k)k!(n-k)!}hdt$$

$$=\frac{(-1)^{n-k}h}{k!(n-k)!}\int_0^n t(t-1)\cdots(t-k+1)(t-k-1)$$

$$\cdots\cdots(t-n)dt \tag{3.1}$$

若令

$$C_k^n = \frac{(-1)^{n-k}}{nk!(n-k)!}\int_0^n \frac{t(t-1)\cdots(t-n)}{t-k}\,dt \tag{3.2}$$

由于　$h=\frac{b-a}{n}$，则

$$A_k=(b-a)C_k^n \tag{3.3}$$

这样计算A_k的问题就变为计算C_k^n了。而C_k^n已不依赖于积分限a与b，而只依赖于节点个数n，故对不同的n可事先将C_k^n算出来。对任一确定的有限区间$[a, b]$，只要以$b-a$去乘C_k^n就可得到系数A_k。于是公式（2.5）就可改写为

$$\int_a^b f(x)dx=(b-a)\sum_{k=0}^n C_k^n f(x_0+kh)+R_n(f) \tag{3.4}$$

此公式，称为牛顿——柯特斯公式，C_k^n 称为柯特斯系数。其余项：

当　$n=2m$ 时

$$R_n(f)=\frac{f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!}\int_a^b x\omega(x)dx,\quad a<\xi<b \tag{3.5}$$

当　$n=2m+1$　时

$$R_n(f)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\int_a^b \omega(x)dx,\quad a<\xi<b \tag{3.6}$$

对公式（3.5）、（3.6）的证明从略。

（二）梯形公式、辛卜生公式

在（3.4）中，当$n=1$时，其系数由（3.2）计算如下：

$$C_0^1=-\int_0^1 (t-1)dt=\frac{1}{2}$$

$$C_1^1=\int_0^1 tdt=\frac{1}{2}$$

代入（3.4），得

$$\int_a^b f(x)dx=(b-a)\left[\frac{1}{2}f(x_0)+\frac{1}{2}f(x_1)\right]+R_1(f)$$

所以

$$\int_a^b f(x)dx=\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]+R_1(f) \qquad (3.7)$$

这就是**梯形公式**。

当 $n=2$ 时，由（3.2）得：

$$C_0^2=\frac{1}{4}\int_0^2(t-1)(t-2)\,dt=\frac{1}{6}$$

$$C_1^2=-\frac{1}{2}\int_0^2 t(t-2)dt=\frac{4}{6}$$

$$C_2^2=\frac{1}{4}\int_0^2 t(t-1)dt=\frac{1}{6}$$

因此，代入（3.4），由于 $x_0=a$，$x_1=\frac{a+b}{2}$，$x_2=b$，则

$$\int_a^b f(x)\,dx=\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]+$$

$$+R_2(f) \qquad (3.8)$$

这就是通常所说的**辛卜生公式**。

梯形公式的几何意义是过A，B两点直线下围成的面积近似代替曲线 $f(x)$下的面积，如图5.1

辛卜生公式则是用抛物线下的面积近似代替曲线 $f(x)$ 下的面积。

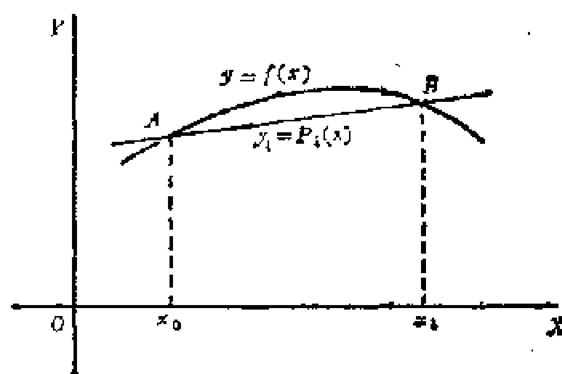


图 5.1

辛卜生公式的代数精确度较高。它是三个节点的内插求积公式，但它具有三次代数精确度。

下面用代数精确度定义来验证此结论是正确的。

设 $f(x)=x^3$ 代入(3.8)左端得

$$\int_a^b x^3 dx=\frac{1}{4}(b^4-a^4)$$

代入(3.8)右端，得

$$\frac{b-a}{6}\left[a^3+4\left(\frac{a+b}{2}\right)^3+b^3\right]$$

$$=(b-a)\frac{(b+a)(b^2+a^2)}{4}=\frac{1}{4}(b^4-a^4)$$

左右端相等。故对 $f(x)$ 为不高于三次的多项式时，(3.8) 式成为精确等式，可以验证 (3.8) 对 $f(x)=x^4$ 不精确成立。从而辛卜生公式具有三次代数精确度。

可以验证，梯形公式具有一次代数精确度。

例 1　用矩形公式、梯形公式、辛卜生公式计算

$$I=\int_0^1 \frac{xe^x}{(1+x)^2}dx$$

精确到10^{-4}。(按定点四位小数计算)

解　用矩形公式：

$$I\doteq(b-a)f(b)=f(1)=0.6796$$

用梯形公式：

$$I\doteq\frac{1}{2}[f(0)+f(1)]=\frac{1}{2}\times0.6796=0.3398$$

用辛卜生公式：

$$I\doteq\frac{1}{6}[f(0)+4f(0.5)+f(1)]$$

$$=\frac{1}{6}(4\times0.3664+0.6796)$$

$$=0.3575$$

I 的精确值为0.35914………

(三) 梯形公式、辛卜生公式的误差

下面讨论公式 (3.7)、(3.8)的误差，即余项。

1　梯形公式的误差

梯形公式是 $n=1$ 的内插求积公式，当 $f''(x)$在$[a, b]$上存在时，被积函数 $f(x)$能写成

$$f(x)=P_1(x)+\frac{f''(\xi)}{2!}(x-a)(x-b)$$

的形式，其中 $P_1(x)$ 为一次多项式， $P_1(a)=f(a)$， $P_1(b)=f(b)$. 对上式两边求积得：

$$\int_a^b f(x)dx=\int_a^b P_1(x)\ dx+$$

$$+\int_a^b \frac{f''(\xi)}{2!}(x-a)(x-b)dx$$

$$R(f)=\int_a^b f(x)dx-\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$$

$$=\frac{1}{2!}\int_a^b f''(\xi)(x-a)(x-b)dx \qquad (3.9)$$

由于 $f''(\xi)$在 $[a, b]$ 上是依赖于x的连续函数，而且在$[a, b]$ 上 $\omega(x)=(x-a)(x-b)\leqslant 0$， 故由积分中值定理，在$[a, b]$内存在一点$\eta$使

$$\int_a^b f''(\xi)(x-a)(x-b)\ dx$$

$$=f''(\eta)\int_a^b (x-a)(x-b)dx$$

$$=-\frac{(b-a)^3}{6}f''(\eta)$$

代入（3.9），则得

$$R(f)=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta), \qquad a<\eta<b \qquad (3.10)$$

2　辛卜生公式的误差

辛卜生公式具有三次代数精确度，故设$f^{(4)}(x)$在$[a, b]$上存在，对被积函数 $f(x)$ 先构造一个三次插值多项式 $p_3(x)$，

使之满足

$$p(x_i)=f(x_i), \qquad i=0,\ 1,\ 2$$

$$p'(x_1)=f'(x_1)$$

由埃尔米特插值公式知

$$f(x)=p_3(x)+\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)(x-x_1)^2(x-b)$$

对此等式两边求积分得：

$$\int_a^b f(x)dx=\int_a^b p_3(x)\ dx+$$

$$+\frac{1}{4!}\int_a^b f^{(4)}(\xi)(x-a)(x-x_1)^2(x-b)\,dx$$

因为辛卜生公式具有3次代数精确度，于是有

$$\int_a^b p_3\ (x)dx=\frac{b-a}{6}[f(a)+4f(x_1)+f(b)]$$

所以

$$R(f)=\int_a^b f(x)dx-\frac{b-a}{6}[f(a)+4f(x_1)+f(b)]$$

$$=\frac{1}{4!}\int_a^b f^{(4)}(\xi)(x-a)(x-x_1)^2(x-b)dx$$

由于在区间$[a,\ b]$上

$$\omega(x)=(x-a)(x-x_1)^2(x-b)\leqslant 0$$

所以由积分中值定理，在$[a,b]$内存在一点η使

$$\int_a^b f^{(4)}(\xi)(x-a)(x-x_1)^2(x-b)dx$$

$$=f^{(4)}\ (\eta)\int_a^b (x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)dx$$

其中

$$\int_a^b (x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)dx=-\frac{(b-a)^5}{120}$$

于是有

$$R(f)=-\frac{1}{4!}\frac{(b-a)^5}{120}f^{(4)}(\eta)$$

$$= -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\eta), \quad a<\eta<b \tag{3.11}$$

（四）辛卜生公式在立体几何上的应用

辛卜生公式（3.8）在求立体体积上有重要应用，可由下述定理看出．

定理 1　设某物体垂直于 Ox 轴的可变截面的面积为 $S(x)$，且

$$S(x) = Ax^3 + Bx^2 + Cx + D, \qquad a \leqslant x \leqslant b$$

其中 A,B,C,D 为常数，则此物体界于 $x=a$ 及 $x=b$ 间的体积 V 由下式给出：

$$V = \frac{H}{6}\left[S(a) + 4S\left(\frac{a+b}{2}\right) + S(b)\right] \tag{3.12}$$

其中 $H=b-a$

此定理的证明是显然的，证明略．

定理 2　设棱台的上、下底面积分别为 S_1，S_2，高为 H．证明其体积 V 由下式给出：

$$V = \frac{H}{3}\left[S_1 + \sqrt{S_1 S_2} + S_2\right] \tag{3.13}$$

证明　设垂直于 O_x 轴的可变横截面的面积为 $S(x)$，则由立体几何知：

$$\frac{S(x)}{S_1} = \frac{(a+x)^2}{a^2}$$

因此，$S(x)$ 是 x 的二次多项式．应用定理 1 就有

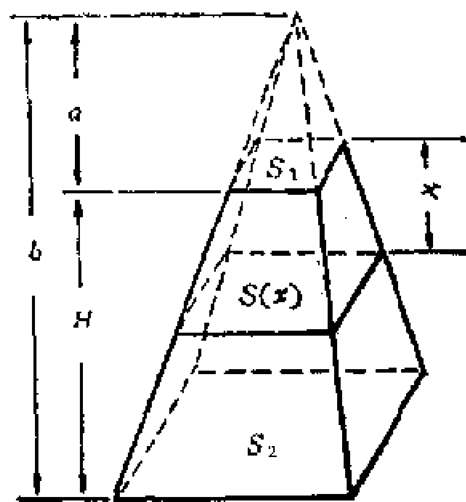


图　5.2

$$V = \frac{H}{6}(S_1 + 4S_3 + S_2) \tag{3.14}$$

其中 S_3 是中截面的面积．再由

$$\frac{S_3}{S_1}=\frac{\left(a+\frac{H}{2}\right)^2}{a^2}$$

知

$$\sqrt{S_3}=\sqrt{S_1}\left(1+\frac{H}{2a}\right)$$

同理有

$$\sqrt{S_2}=\sqrt{S_1}\left(1+\frac{H}{a}\right)$$

由此两式中消去$\frac{H}{a}$，得

$$S_3=\frac{1}{4}(S_1+2\sqrt{S_1S_2}+S_2)$$

将此 S_3 代入（3.14），就有

$$V=\frac{H}{6}(S_1+S_1+2\sqrt{S_1S_2}+S_2+S_2)$$

$$=\frac{H}{3}(S_1+\sqrt{S_1S_2}+S_2)$$ 证完。

例 2　用（3.14）导出计算圆台，圆柱，圆锥的体积公式。

解　设圆台上底半径为 r，下底半径为 R（如图 5.3），则中截面半径 $x=(R+r)/2$，而且

$$S_1=\pi r^2,$$

$$S_3=\frac{\pi(R+r)^2}{4}$$

$$S_2=\pi R^2,$$

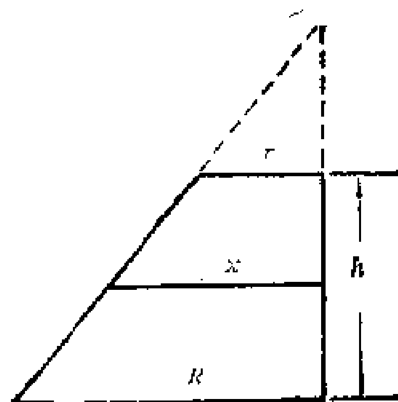


图 5.3

代入（3.14）中，化简后得：

$$V=\frac{h\pi}{3}(R^2+Rr+r^2) \tag{3.15}$$

当 $r=R$时（圆柱），（3.15）变形为

$$V=\frac{h\pi}{3}\cdot 3R^2=\pi R^2 h \tag{3.16}$$

当 $r=0$时（圆锥）（3.15）变形为

$$V=\frac{h\pi}{3}R^2 \tag{3.17}$$

（3.15）、（3.16）、（3.17）分别为圆台、圆柱、圆锥的体积公式。

对于棱柱、棱锥、球缺、球台和球等的体积公式，均可用(3.12)求出.所以有人把（3.12）叫做计算体积的“万能公式”。

习 题 5.3

1 用梯形公式、辛卜生公式计算定积分

$$\int_0^1 \frac{1}{1+x^2}dx$$

2 写出 $n=3$ 的牛顿—柯特斯公式，并求出其代数精确度。利用此公式计算上面的积分。

3 用（3.12）导出计算球、球台的体积公式。

§4 复化公式

梯形公式、辛卜生公式在区间 $[a,b]$ 不太大时，用来近似计算定积分是简单实用的。但是当区间 $[a,b]$ 比较大时，有时精度差一些，为了提高精度，可以将区间 n 等分，对每一个小区间采用梯形或辛卜生公式，然后将其结果加起来即可。这样得到的公式就称为复化梯形或复化辛卜生公式。

（一）复化梯形公式

将积分区间 $[a,b]$ 分成 n 等分，设 $h=\frac{b-a}{n}$，则节点为

$$x_i = a + ih, \quad i = 0,1,2,\cdots,n$$

对每个小区间应用梯形公式，然后相加，则得

$$I = \int_a^b f(x)dx \doteq \frac{h}{2}\{[f(x_0) + f(x_1)] + $$

$$+ [f(x_1) + f(x_2)] + \cdots\cdots + [f(x_{n-1}) + f(x_n)]\}$$

$$= \frac{h}{2}\left[f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b)\right] \tag{4.1}$$

此式称为**复化梯形公式**。

当$f(x)$在$[a,b]$内有连续的二阶导数时，公式（4.1）的误差推导如下：

在区间$[x_i, x_{i+1}]$上梯形公式的误差已知为

$$R_i(f) = -\frac{h^3}{12}f''(\eta_i), \quad x_i < \eta_i < x_{i+1}$$

所以在区间$[a,b]$上（4.1）的误差为

$$R_n(f) = \sum_{i=1}^{n} R_i(f) = -\frac{h^3}{12}\sum_{i=1}^{n} f''(\eta_i)$$

又因为$f''(x)$在$[a,b]$上连续，由连续函数性质知，在$[a,b]$内存在一点η使

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f''(\eta_i) = f''(\eta), \quad a < \eta < b$$

于是

$$R_n(f) = -\frac{h^3}{12}nf''(\eta)$$

$$= -\frac{(b-a)}{12}h^2 f''(\eta), \quad a < \eta < b \tag{4.2}$$

（二）复化辛卜生公式

与复化梯形公式类似，可以推导出复化辛卜生公式。不同之处在于必须将区间$[a,b]$分成$n = 2m$等分，对每个小区间即$[x_i, x_{i+2}]$应用辛卜生公式，然后相加，则得

$$I=\int_a^b f(x)dx \doteq \sum_{i=0}^{m-1}\int_{x_{2i}}^{x_{2i+2}} f(x)dx$$

$$\doteq \frac{2h}{6}\{[f(a)+4f(x_1)+f(x_2)]+\cdots+$$

$$+[f(x_{n-2})+4f(x_{n-1})+f(x_n)]\}$$

$$=\frac{h}{3}\left[f(a)+4\sum_{i=1}^{m}f(x_{2i-1})+\right.$$

$$\left.2\sum_{i=1}^{n-1}f(x_{2i})+f(b)\right] \tag{4.3}$$

公式（4.3）称为**复化辛卜生公式**。

当 $f(x)$ 在$[a,b]$内有连续的四阶导数时，公式（4.3)的误差推导如下：

在区间$[x_i,x_{i+2}]$上辛卜生公式的误差已知为

$$R_i(f)=-\frac{(2h)^5}{2880}f^{(4)}(\eta_i),\quad x_i<\eta_i<x_{i+2}$$

所以在$[a,b]$上（4.3）的误差为

$$R_n(f)=\sum_{i=1}^{m} R_i(f)=-\frac{(2h)^5}{2880}\sum_{i=1}^{m}f^{(4)}(\eta_i)$$

由于$f^{(4)}(x)$在$[a,b]$上连续，由连续函数性质知，在$[a,b]$内，必存在一点η使

$$\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}f^{(4)}(\eta_i)=f^{(4)}(\eta),\qquad a<\eta<b$$

于是

$$R_n(f)=-\frac{(2h)^5}{2880}mf^{(4)}(\eta)$$

$$=-\frac{(2h)m}{2880}\cdot(2h)^4f^{(4)}(\eta)$$

$$=-\frac{(b-a)}{2880}(2h)^{(4)}f^{(4)}(\eta)$$

$$=-\frac{(b-a)}{180}h^4f^{(4)}(\eta),\qquad a<\eta<b \tag{4.4}$$

例　用复化的梯形公式、辛卜生公式计算

$$I=\int_0^1 \frac{xe^x}{(1+x)^2}dx \quad (\text{精确到}10^{-4})$$

解　取 $h=\dfrac{1-0}{8}=0.125$

列表计算如下：

x_k	xe^x	$(1+x)^2$	$\dfrac{xe^x}{(1+x)^2}$	梯　形	辛卜生
0	0	1	0	1	1
0.125	0.1416	1.2656	0.1119	2	4
0.250	0.3210	1.5625	0.2054	2	2
0.375	0.5456	1.8906	0.2886	2	4
0.500	0.8244	2.2500	0.3664	2	2
0.625	1.1676	2.6406	0.4422	2	4
0.750	1.5878	3.0625	0.5185	2	2
0.875	2.0990	3.5156	0.5971	2	4
1.000	2.7183	4.0000	0.6796	1	1
Σ				5.7399	8.6194
I				0.3587	0.3591

实际上，

$$I=\int_0^1 \frac{xe^x}{(1+x)^2}dx=\frac{e^x}{1+x}\Bigg|_0^1=\frac{e}{2}-1=0.3591409\cdots$$

由上表可看出辛卜生公式较为精确。

（三）事后误差估计法——自动积分法

梯形公式、辛卜生公式都有计算简单的优点，而辛卜生公式的精度还比较高，因此用的就更多。不过它要求被积函数的光滑度也高。不管怎样，估计误差都不是很容易的。

下面介绍一种事后估计误差的方法．其基本想法是，将区间逐次分半进行计算，用前后两次算得的结果进行估计．若合乎精度要求，就停止运算，否则将区间再分半进行计算，然后再用前后两次的结果进行估计，直至达到精度要求为止．

1　对梯形公式

设把区间 n 等分，应用公式（4.1）计算出积分近似值 T_n 则定积分的值 I：

$$I = T_n - \frac{(b-a)}{12}\left(\frac{b-a}{n}\right)^2 f''(\xi_n) \tag{4.5}$$

若把区间再分半为 $2n$ 等分，应用公式（4.1）计算出积分近似值为 T_{2n}，则

$$I = T_{2n} - \frac{(b-a)}{12}\left(\frac{b-a}{2n}\right)^2 f''(\xi_{2n}) \tag{4.6}$$

当 $f''(x)$ 在 $[a, b]$ 上变化不大时，可设

$f''(\xi_n) \doteq f''(\xi_{2n})$，由（4.5），（4.6）可得

$$\frac{I - T_n}{I - T_{2n}} \doteq 4$$

所以

$$T - T_n \doteq 4(I - T_{2n})$$

即

$$I \doteq T_{2n} + \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n) \tag{4.7}$$

当 $\left|\frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)\right| \leqslant \varepsilon$（予定精确度）时，$T_{2n}$ 就是所求的近似值．

另一方面（4.7）的右端第二项是 T_{2n} 的修正项．它与 T_{2n} 之和显然比 T_{2n} 更靠近于精确值 I．

2　对辛卜生公式

把区间分成为 $n=2m$ 等分，设已根据公式（4.3）算出积分近似值为 S_{2m}，则

$$I=S_{2n}-\frac{(b-a)}{180}\left(\frac{b-a}{2n}\right)^4 f^{(4)}(\xi_{2n}) \tag{4.9}$$

当$f^{(4)}(x)$在$[a, b]$上变化不大时，可设

$f^{(4)}(\xi_n)\doteq f^{(4)}(\xi_{2n})$，由（4.8）、（4.9）可得

$$\frac{I-S_n}{I-S_{2n}}\doteq 16$$

于是有

$$I-S_n\doteq 16(I-S_{2n})$$

所以

$$I\doteq S_{2n}+\frac{1}{15}(S_{2n}-S_n) \tag{4.10}$$

当 $\left|\frac{1}{15}(S_{2n}-S_n)\right|\leqslant\varepsilon$ （予定精度）时，S_{2n}就是所求近似值。

另一方面（4.10）的右端第二项是S_{2n}的修正项，它与S_{2n}之和显然比S_{2n}更靠近于精确值 I 。

上述方法不仅是误差估计法，它也是在电子计算机上很适用的数值积分法。因为在计算进程中，它可根据精度要求，自动确定 n 。所以该法也叫自动积分法。

习　题　5·4

1　用梯形公式、辛卜生公式计算积分

（1）$\int_0^1\frac{dx}{1+x^3}$　　（取 $n=8$）。

（2）$\int_1^2\frac{x}{ln(x+1)}dx$　（取 $n=6$）。

2　证明复化梯形公式及复化辛卜生公式当 $n\to\infty$时，收敛于$\int_a^b f(x)\,dx$。

3 从地面向上发射一枚火箭，在最初80秒钟以内，记录其加速度如下表，试求火箭在第80秒时的速度。

t	0	10	20	30	40	50	60	70	80
a	30.00	31.63	33.44	35.74	37.75	40.33	43.29	46.69	50.67

4 导出用辛卜生公式计算重积分

$$\int_a^b\int_c^d f(x,\ y)dxdy$$

的公式，并用它计算

$$\int_0^2\int_{-1}^1(x^2+2y^2)dxdy \qquad (\text{精确到}10^{-4})$$

5 用自动积分法计算第 1 题中的积分，精确到10^{-5}。

6 计算积分：

（1） $\int_0^1 \frac{\sin x}{x}dx$

（2） $\int_0^1 e^{-x^2}dx$ 精确到10^{-4}

§5 龙贝格（Romberg）公式

（一）数值方法中的加速收敛技巧

从前几节介绍的几种求积公式看到，提高计算结果的精度往往是以增加运算量作为代价的。是否可能少增加运算量而也把精确度提到一定的高度呢？这就是加速收敛技巧的指导思想。对于给定的函数 $f(x)$和区间$[a,\ b]$，由复化梯形公式

$$I=T_n+\frac{b-a}{12}h^2f''(\xi), \qquad a<\xi<b$$

计算的结果T_n可看作为步长h的函数，其中

$$T_n = T(h) = h\left[\frac{f(a)}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + \frac{f(b)}{2}\right] \quad (5.1)$$

容易证明（5.1）对区间$[a, b]$上的任何可积函数 $f(x)$，总有

$$\lim_{h\to 0} T(h) = \int_a^b f(x)dx = T(0) \quad (5.2)$$

很清楚h越小，越精确，但计算量相当大，实际中有时$T(0)$是无法求出的。于是可以提出这样一个问题，能否通过 $T(h)$，$T\left(\frac{h}{2}\right)$，……，$T\left(\frac{h}{2^k}\right)$，构造出一个新序列使它更快的收敛于$T(0)$呢？答案是肯定的，它的几何解释为：以 h 为横轴，以$T(h)$为纵轴，那么点列$(h, T(h))$，$\left(\frac{h}{2}, T\left(\frac{h}{2}\right)\right)$，…，$\left(\frac{h}{2^k}, T\left(\frac{h}{2^k}\right)\right)$……的极限为（0，$I$）现通过任意相邻两点

$\left(\frac{h}{2^k}, T\left(\frac{h}{2^k}\right)\right)$，

$\left(\frac{h}{2^{k+1}}, T\left(\frac{h}{2^{k+1}}\right)\right)$

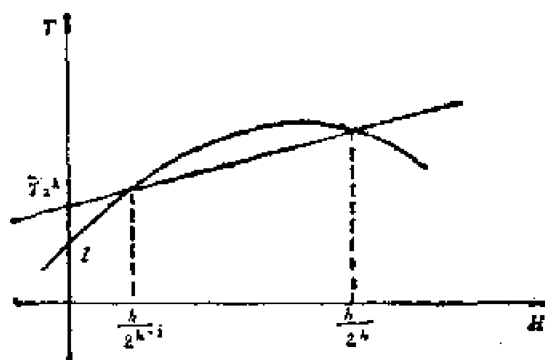


图 5.4

作一直线，并延伸到T轴，得到一截距$\widetilde{T}_2^k$，若$\widetilde{T}_2^k < T\left(\frac{h}{2^{k+1}}\right)$，则构造新点列$\widetilde{T}_2^k$比原点列收敛快，这就是线性外插加速的思想（如图5.4）。

一般情况下它是这么一个问题，通过序列 $f(h)$，$f\left(\frac{h}{2}\right)$，……，$f\left(\frac{h}{n}\right)$……，构造一个新序列，使它更快地收敛于$f(0)$。在某种条件下这是可以办到的。运用泰勒展开式：如

$$f(h)=f(0)+hf'(0)+\frac{h^2}{2!}f''(0)+$$
$$+\frac{h^3}{3!}f'''(0)+\cdots \qquad (5.3)$$

$$f\left(\frac{h}{2}\right)=f(0)+\frac{h}{2}f'(0)+\frac{1}{2!}\left(\frac{h}{2}\right)^2 f''(0)+$$
$$+\frac{1}{3!}\left(\frac{h}{2}\right)^3 f'''(0)+\cdots \qquad (5.4)$$

如果 $f'(0)\neq 0$，那么 $f(h)$，$f\left(\frac{h}{2}\right)$逼近$f(0)$的阶都是$O(h)$，现将（5.4）×2减去（5.3）便得

$$f_1(h)=2f\left(\frac{h}{2}\right)-f(h)$$
$$=f(0)-\frac{h^2}{4}f''(0)-\frac{h^3}{8}f'''(0)+\cdots$$

如果 $f''(0)\neq 0$，那末 $f_1(h)$逼近 $f(0)$的误差是$O(h^2)$，这就说明，通过简单运算得到新序列 $f_1(h)$，比原序列$f(h)$更快的收敛于$f(0)$。从 $f_1(h)$出发再继续做下去，会得到序列 $f_2(h)$更快的收敛于 $f(0)$。如

$$f_1(h)=f(0)-\frac{h^2}{4}f''(0)-\frac{h^3}{8}f'''(0)+\cdots \qquad (5.5)$$

$$f_1\left(\frac{h}{2}\right)=f(0)-\frac{h^2}{16}f''(0)-\frac{h^3}{64}f'''(0)+\cdots \qquad (5.6)$$

将（5.6）×4减去（5.5）并除以3得

$$f_2(h)=\frac{4f_1\left(\frac{h}{2}\right)-f_1(h)}{3}$$
$$=f(0)+\frac{h^3}{48}f'''(0)+\cdots\cdots$$

如果$f'''(0)\neq 0$序列$f_2(h)$逼近$f(0)$的误差阶为$O(h^3)$。这种加速收敛的算法为外推算法。

（二）李查逊外推算法

我们针对一类问题来建立外推法。假设有一个量 F^*（与 h 无关），由一个步长为 h 的函数 $F_1(h)$ 去逼近，其截断误差为

$$R(F^*)=F^*-F_1(h)=$$
$$=\alpha_1 h^{p_1}+\alpha_2 h^{p_2}+\cdots+\alpha_k h^{p_k}+\cdots \tag{5.7}$$

其中 $p_k>p_{k-1}>\cdots>p_1>0$，α_i 为与 h 无关的常数。(5.7) 表示 $F_1(h)$ 逼近于 F^* 的误差阶是 h^{p_1}。通过 (5.7)来构造一个新序列，使其逼近F^*的误差阶为 h^{p_2}

具体做法是，选定 q 满足$1-q^{p_1}\neq 0$的适当常数，将 (5.7) 中的 h 用 qh 来代替，则有

$$F^*-F_1(qh)=\alpha_1(qh)^{p_1}+\alpha_2(qh)^{p_2}+$$
$$+\cdots+\alpha_k(qh)^{p_k}+\cdots \tag{5.8}$$

然后由 (5.8)减 (5.7) $\times q^{p_1}$得：

$$(1-q^{p_1})F^*-(F_1(qh)-q^{p_1}F_1(h))$$
$$=\alpha_2(q^{p_2}-q^{p_1})h^{p_2}+\cdots+\alpha_k(q^{p_k}-q^{p_1})h^{p_k}+\cdots$$

也可写成

$$F^*-\frac{F_1(qh)-q^{p_1}F_1(h)}{1-q^{p_1}}$$

$$=\alpha_2\frac{q^{p_2}-q^{p_1}}{1-q^{p_1}}h^{p_2}+\cdots+\alpha_k\frac{q^{p_k}-q^{p_1}}{1-q^{p_1}}h^{p_k}+\cdots$$

$$=\alpha_2^{(2)}h^{p_2}+\alpha_3^{(2)}h^{p_3}+\cdots+\alpha_k^{(2)}h^{p_k}+\cdots$$

其中

$$\alpha_2^{(2)}=\alpha_2\frac{q^{p_2}-q^{p_1}}{1-q^{p_1}},\quad\cdots\cdots,\quad \alpha_k^{(2)}=\alpha_k\frac{q^{p_k}-q^{p_1}}{1-q^{p_1}}$$

都是与 h 无关的常数，若令

$$F_2(h)=\frac{F_1(qh)-q^{p_1}F_1(h)}{1-q^{p_1}}$$

那么$F_2(h)$逼近F^*的误差阶为h^{p_2}，继续做下去，我们选定 q 满足 $1-q^{p_m}\neq 0$ ($m=1,2,\cdots$) 的适当正数。并定义序列

$$\begin{cases} F_{m+1}(h) = \dfrac{F_m(qh) - q^{p_m}F_m(h)}{1 - q^{p_m}} \\ F_1(h) = F(h) \quad m = 1,2,3,\cdots\cdots \end{cases} \tag{5.9}$$

$F_{m+1}(h)$ 逼近 F^*的误差为

$$F^* - F_{m+1}(h) = a_{m+1}^{(m+1)}h^{p_{m+1}} + a_{m+2}^{(m+2)}h^{p_{m+2}} + \cdots\cdots$$

算法(5.9)就称为李查逊外推法．算法步骤如下：

(1) $F_1(h)$	(3) $F_2(h)$	(6) $F_3(h)$	(10) $F_4(h)$
(2) $F_1(qh)$	(5) $F_2(qh)$	(9) $F_3(qh)$	⋮
(4) $F_1(q^2h)$	(8) $F_2(q^2h)$	⋮	
(7) $F_1(q^3h)$	⋮		
⋮			

（三）龙贝格算法

它是根据李查逊外推算法的思想，以复化梯形公式为基础，计算出分半加密区间的各近似值T_i而得到一系列结果

$$T_1, \ T_2, \ T_{2^2}, \ \cdots, \ T_{2^k}, \cdots \tag{5.10}$$

其中T_{2^k}表示是把区间$[a,b]$分成2^k等分，其区间长为$h=(b-a)/2^k$，内分点为 $x_i=a+hi \quad (i=1,2,\cdots,2^k-1)$的积分值．

它的误差为

$$\int_a^b f(x)dx - T_{2^k} = -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta), \qquad a<\eta<b$$

可以证明复化梯形公式的误差还可以表示为

$$R(f,T_{2^k}) = I - T_{2^k} = a_2h^2 + a_4h^4 + a_6h^6 + \cdots \tag{5.11}$$

其中a_2，a_4，a_6，…都是与h无关的常数．

通过（5.10）来构造新序列，更快逼近I，其具体做法如下：

由李查逊外推法(5.9) 取 $q=\dfrac{1}{2}$，$p_m=2$ 得新序列

$$S_2 = \frac{4T_2 - T_1}{4 - 1}$$

$$S_4 = \frac{4T_4 - T_2}{4 - 1} \qquad (5.12)$$

$$\vdots$$

$$S_{2^k} = \frac{4T_{2^k} - T_{2^{k-1}}}{4 - 1}$$

再从（5.12），由李查逊外推法（5.9）取$q = \frac{1}{2}$，$p_m = 4$，得新序列

$$C_2^2 = \frac{4^2 S_4 - S_2}{4^2 - 1}$$

$$C_2^3 = \frac{4^2 S_2^3 - S_2^2}{4^2 - 1} \qquad (5.13)$$

$$\vdots$$

$$C_2^k = \frac{4^2 S_2^k - S_2^{k-1}}{4^2 - 1}$$

继续做下去可得：

$$R_2^3 = \frac{4^3 C_2^3 - C_2^2}{4^3 - 1}$$

$$R_2^4 = \frac{4^3 C_2^4 - C_2^3}{4^3 - 1} \qquad (5.14)$$

$$\vdots$$

$$R_2^k = \frac{4^3 C_2^k - C_2^{k-1}}{4^3 - 1}$$

（5.14）称为**龙贝格公式**。

具体计算列表如下：

---

* 参看《数值逼近》李岳生、黄友谦编，人民教育出版社，1978，第四章§2.4。

l	区间个数	梯形公式T	辛卜生公式S	柯特斯公式C	龙贝格公式R
0	$2^0=1$	T_1			
1	$2^1=2$	T_2	S_2		
2	$2^2=4$	T_{2^2}	S_{2^2}	C_{2^2}	
3	$2^3=8$	T_{2^3}	S_{2^3}	C_{2^3}	R_{2^3}
4	$2^4=16$	T_{2^4}	S_{2^4}	C_{2^4}	R_{2^4}
5	$2^5=32$	T_{2^5}	S_{2^5}	C_{2^5}	R_{2^5}

一般运算到同列相邻两结果之差

$$|R_{2^k}-R_{2^{k-1}}|<\varepsilon \quad (\text{预定精度})$$

就停止运算。本来按上面构造新公式的规律，还可以继续做下去，但我们不难发现再往下做下去，前后两个公式差别就不大了。但工作量确增加了不少，因此推导出公式(5.14)便可终止。

（四）几点说明

1　在（5.10）中，计算出$T_{2^{k-1}}$以后去计算T_{2^k}时，不需从头计算，只需计算新增加内点的函数值，已算出的函数值可设法加以利用，以减少重算函数值的次数，这时 $T_{2^{k-1}}$和 T_{2^k}的关系如下：

当　$k=1$时，

$$T_1=(b-a)\left[\frac{1}{2}f(a)+\frac{1}{2}f(b)\right]$$

$$T_2=\frac{b-a}{2}\left[\frac{1}{2}f(a)+f\left(\frac{a+b}{2}\right)+\frac{1}{2}f(b)\right]$$

$$=\frac{b-a}{2}\left[\frac{1}{2}f(a)+\frac{1}{2}f(b)\right]+\frac{b-a}{2}f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

$$=T_1/2+\frac{b-a}{2}f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

当　$k=2$时，

$$T_4=\frac{b-a}{4}\left[\frac{1}{2}f(a)+\sum_{i=1}^{3}f\left(a+\frac{b-a}{4}\cdot i\right)+\frac{1}{2}f(b)\right]$$

$$=\frac{T_2}{2}+\frac{b-a}{4}\left[f\left(a+\frac{b-a}{4}\right)+f\left(a+\frac{b-a}{4}\cdot 3\right)\right]$$

于是有

$$T_{2^k}=\frac{b-a}{2^k}\left[\frac{1}{2}f(a)+\sum_{i=1}^{2^k-1}f\left(a+\frac{b-a}{2^k}\cdot i\right)+\frac{1}{2}f(b)\right]$$

$$=\frac{T_{2^{k-1}}}{2}+\frac{b-a}{2^k}\sum_{i=1}^{2^{k-1}}f\left[a+\frac{b-a}{2^k}(2i-1)\right] \quad (5.15)$$

2　由 S_2 不难看出它是具有3次代数精确度的辛卜生公式。因为

$$S_2=\frac{4T_2-T_1}{3}=\frac{4}{3}T_2-\frac{1}{3}T_1$$

$$=\frac{4}{3}\cdot\frac{b-a}{2}\left[\frac{1}{2}f(a)+f\left(\frac{a+b}{2}\right)+\frac{1}{2}f(b)\right]-$$

$$-\frac{1}{3}(b-a)\left[\frac{1}{2}f(a)+\frac{1}{2}f(b)\right]$$

$$=\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]$$

例　计算积分 $I=\int_0^1\frac{4}{1+x^2}dx$，精确到$10^{-5}$。

解　根据公式（3,7）由于 $f(x)=\frac{4}{1+x^2}$，$a=0$，$b=1$，故

1°　$T_1=\frac{1}{2}[f(0)+f(1)]=\frac{1}{2}(4+2)=3$

2°　根据公式（5，15）计算出

$$T_2=\frac{T_1}{2}+\frac{1}{2}f\left(\frac{1}{2}\right)=\frac{3}{2}+\frac{8}{5}=3.1$$

$$T_2^2=\frac{T_2}{2}+\frac{1}{4}\left[f\left(\frac{1}{4}\right)+f\left(\frac{3}{4}\right)\right]=3.13118$$

$$T_2^3=\frac{T_4}{2}+\frac{1}{8}\left[f\left(\frac{1}{8}\right)+f\left(\frac{3}{8}\right)+f\left(\frac{5}{8}\right)+f\left(\frac{7}{8}\right)\right]$$

$$=3.13899$$

$$T_2^4=3.14094$$

3° 根据公式（5.12）计算出

$$S_2=\frac{4T_2-T_1}{3}=3.1333$$

$$S_2^2=\frac{4T_4-T_2}{3}=3.14157$$

$$S_2^3=\frac{4T_8-T_4}{3}=3.14159$$

$$S_2^4=3.14159$$

4° 根据公式（5.13）计算出

$$C_4=\frac{4^2S_4-S_2}{15}=3.14212$$

$$C_2^3=\frac{4^2S_2^3-S_2^2}{15}=3.14159$$

$$C_2^4=3.14159$$

5° 根据公式（5.14）计算出

$$R_2^3=\frac{4^3C_2^3-C_2^2}{63}=3.14158$$

$$R_2^4=\frac{4^3C_2^4-C_2^3}{63}=3.14159$$

由于 $|R_{16}-R_8|\leqslant 0.00001$，于是得

$$\int_0^1\frac{4}{1+x^2}dx\doteq 3.14159$$

实际上

$$I=\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}dx = 4\operatorname{arc\,tg} x \Big|_0^1$$

$$=\pi = 3.1415926\cdots\cdots$$

习　题　5·5

1　用龙贝格方法计算积分（精确到10^{-4}）

$$I=\int_0^1 \frac{1}{1+x^2}dx$$

2　用龙贝格方法计算积分

$$I=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^1 e^{-x^2}dx$$

预定精度 $\varepsilon=10^{-3}$。

§6　高斯（Gauss）求积公式

从前面的讨论中我们知道内插求积公式代数精确度与节点个数有关，比如：n个节点的内插求积公式

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n-1} A_k f(x_k) + R_n(f) \tag{6.1}$$

它至少具有 $n-1$ 次代数精确度，为此要提高精度必须增加节点。现在提出这样一个问题，如果节点个数固定，适当选取节点能否提高内插求积公式（6.1）的代数精确度呢？答案是肯定的，只要恰当地选择节点 x_k，就能使（6.1）式具有 $2n-1$ 次代数精确度，但不能再高。证明见下面定理 1 。

定义　具有$2n-1$次代数精确度的内插求积公式（6.1）称为高斯求积公式，其节点

$$x_1,\ x_2,\ \cdots, x_{n-1},\ x_n$$

称为高斯节点。

在这里我们假定（6.1）的积分限为

$a=-1, b=1$，对于一般情况可作变换

$$x=\frac{a+b}{2}+\frac{b-a}{2}t$$

使$[a,b]$变为$[-1,1]$。

定理 1 $x_1,x_2,\cdots\cdots,x_n$ 是高斯节点的充分必要条件是 n 次多项式

$$\omega(x)=(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n) \tag{6.2}$$

与一切次数小于或等于$n-1$次的多项式$Q(x)$都正交：

$$\int_{-1}^{1}Q(x)\omega(x)dx=0 \tag{6.3}$$

证明 必要性：设 $x_1,x_2,\cdots,x_n$是高斯节点，即(6.1)对任何$2n-1$次多项式都精确地成立。

因$Q(x)$的次数$\leqslant n-1$，故$Q(x)\omega(x)$的次数$\leqslant 2n-1$，代入(6.1)，且$\omega(x_k)=0$，则

$$\int_{-1}^{1}Q(x)\omega(x)dx=\sum_{k=1}^{n}A_kQ(x_k)\omega(x_k)=0$$

即(6.3)成立。

充分性：设$f(x)$是次数$\leqslant 2n-1$的多项式，以$\omega(x)$除$f(x)$得

$$f(x)=Q(x)\omega(x)+r(x) \tag{6.4}$$

其中$Q(x),r(x)$的次数均$\leqslant n-1$，对(6.4)从-1到1作积分，由(6.3)可得

$$\int_{-1}^{1}f(x)dx=\int_{-1}^{1}Q(x)\omega(x)dx+\int_{-1}^{1}r(x)dx$$
$$=\int_{-1}^{1}r(x)dx \tag{6.5}$$

又因(6.1)是内插求积公式，$r(x)$的次数$\leqslant n-1$，故

$$\int_{-1}^{1}r(x)dx=\sum_{k=1}^{n}A_kr(x_k) \tag{6.6}$$

精确成立。但由(6.4)知，$f(x_k)=r(x_k)$，于是由(6.5)，(6.6)知

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx=\sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$$

精确成立。

最后证明：对$2n$次多项式$f(x)=\omega^2(x)$，求积公式（6.1）不能精确成立。

事实上，将$f(x)=\omega^2(x)$代入（6.1）式两端：

$$右端=\sum_{k=1}^{n} A_k\omega^2(x_k)=0$$

$$左端=\int_a^b \omega^2(x)dx>0$$

即（6.1）式对$2n$次多项式 $\omega^2(x)$不精确成立。

从而（6.1）具有 $2n-1$ 次代数精确度，即 $x_1,x_2,\cdots,x_n$为高斯节点。证完。

由定理1可知，若能找到满足（6.3)的 $\omega(x)$，求出其根，则高斯节点也就找到了。

由第四章§9知满足（6.3）的n次多项式 $\omega(x)$ 只能是首项系数等于1的勒让德多项式

$$\tilde{P}_n(x)=\frac{2^n(n!)^2}{(2n)!}P_n(x)=\omega(x)$$

这就是说用n次勒让德多项式的n个根（它有n个不相等的实根）作为节点，构造的内插求积公式具有$2n-1$次代数精确度。

定理2 高斯求积公式的系数 A_k 都是正的，且

$$A_k=\int_{-1}^{1}\left\{\frac{\omega(x)}{(x-x_k)\omega'(x_k)}\right\}dx$$

$$=\frac{2}{1-x_k^2}\left\{\frac{\omega(1)}{\omega'(x_k)}\right\}^2,\qquad k=1,2,\cdots,n$$

证明 因高斯求积公式对于次数 $\leqslant 2n-1$的多项式都精确地成立，而$\left\{\dfrac{\omega(x)}{(x-x_k)\omega'(x_k)}\right\}^2$ 是 $2n-2$次多项式，故由高斯

求积公式（6.1）得：

$$\int_{-1}^{1}\left\{\frac{\omega(x)}{(x-x_k)\omega'(x_k)}\right\}^2 dx$$

$$=\sum_{j=1}^{n} A_j\left\{\frac{1}{\omega'(x_k)}\right\}^2\left\{\frac{\omega(x)}{x-x_k}\right\}^2_{x=x_j}$$

但

$$\left\{\frac{\omega(x)}{x-x_k}\right\}_{x=x_j}=\begin{cases}0 & 当\ j\neq k\ 时\\ \omega'(x_k) & 当\ j=k\ 时\end{cases} \tag{6.7}$$

所以

$$A_k=\int_{-1}^{1}\left\{\frac{\omega(x)}{(x-x_k)\omega'(x_k)}\right\}^2 dx>0,\quad k=1,2,\cdots,n$$

因为

$$A_k=\left(\frac{1}{\omega'(x_k)}\right)^2\int_{-1}^{1}\left\{\frac{\omega(x)}{x-x_k}\right\}^2 dx \tag{6.8}$$

右端的积分，由分部积分得：

$$\int_{-1}^{1}\left\{\frac{\omega(x)}{x-x_k}\right\}^2 dx=-\frac{\omega^2(x)}{x-x_k}\Bigg|_{-1}^{1}+\int_{-1}^{1}\frac{2\omega(x)\omega'(x)}{x-x_k}dx$$

因为 $\omega(1)=(-1)^n\omega(-1)$，故

$$\int_{-1}^{1}\left\{\frac{\omega(x)}{x-x_k}\right\}^2 dx=-\frac{2\omega^2(1)}{1-x_k^2}+2\int_{-1}^{1}\frac{\omega(x)\omega'(x)}{x-x_k}dx$$

但 $\dfrac{\omega(x)\omega'(x)}{x-x_k}$ 是 $2n-2$ 次多项式，且当 $x=x_j$ $j\neq k$ 时为0。

用高斯求积公式并由（6.7）则有

$$\int_{-1}^{1}\left\{\frac{\omega(x)}{x-x_k}\right\}^2 dx=-\frac{2\omega^2(1)}{1-x_k^2}+2A_k\{\omega'(x_k)\}^2$$

代入（6.8）式，解出A_k，即得

$$A_k=\frac{2}{1-x_k^2}\left\{\frac{\omega_n(1)}{\omega'(x_k)}\right\}^2,\quad k=1,2,\cdots,n$$

证完。

定理 3 设函数 $f(x)$ 在 $[-1,1]$ 有 $2n$ 阶导数，则高斯求积公式的余项为

$$R(f)=\frac{2^{2n+1}}{2n+1}\ \frac{(n!)^4}{[(2n)!]^3}f^{(2n)}(\eta),\quad -1<\eta<1 \quad (6.9)$$

证明 由第四章§5知过 n 个高斯节点的爱尔米特插值公式为

$$f(x)=H(x)+\frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!}\omega^2(x) \tag{6.10}$$

其中 $\xi\in(-1,1)$，$H(x)$ 为 $2n-1$ 次多项式，

$$\omega(x)=(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n)$$

对（6.10）从 -1 到 1 积分，则得

$$\int_{-1}^{1}f(x)dx-\int_{-1}^{1}H(x)dx$$

$$=\frac{1}{(2n)!}\int_{-1}^{1}f^{(2n)}(\xi)\omega^2(x)dx$$

因为高斯公式具有 $2n-1$ 次代数精确度，$\omega^2(x)$ 在 $[-1,1]$ 上不变号，所以存在 $\eta\in(-1,1)$，使

$$\int_{-1}^{1}f(x)dx-\sum_{k=1}^{n}A_kH(x_k)$$

$$=\frac{f^{(2n)}(\eta)}{(2n)!}\int_{-1}^{1}\omega^2(x)dx \tag{6.11}$$

但

$$\omega(x)=\frac{2^n(n!)^2}{(2n)!}p_n(x)$$

为首项系数等于1的勒让德多项式，并考虑到它的正交性，所以由第四章§9 知

$$\int_{-1}^{1}\omega^2(x)dx=\left[\frac{2^n(n!)^2}{(2n)!}\right]^2\int_{-1}^{1}p_n^2(x)dx$$

$$=\left[\frac{2^n(n!)^2}{(2n)!}\right]^2\frac{2}{2n+1}$$

将上式代入（6.11）的右端，经整理后便得（6.9)式。证完。

对于 $n=2$ 的高斯公式，从几何直观地看，即是能找到 x_1，x_2 使通过 $(x_1, f(x_1))$ 及 $(x_2, f(x_2))$ 的直线在〔$-1, 1$〕上围成的面积同三次多项式 $y=f(x)$ 在〔$-1, 1$〕上围成的面积相等，如图 5.5 所示。

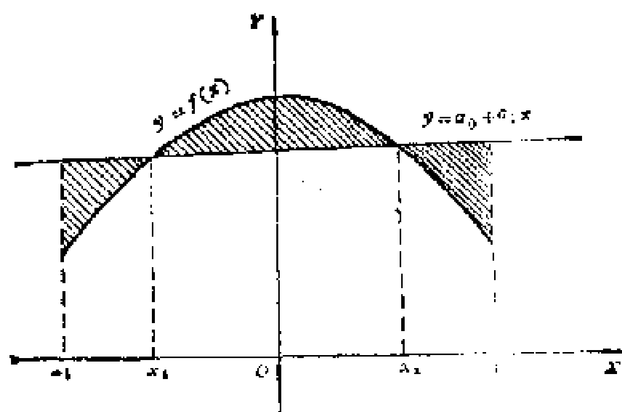


图 5.5

其中

$$x_1=-\frac{1}{\sqrt{3}}, \qquad x_2=\frac{1}{\sqrt{3}}, \quad A_1=A_2=1$$

即

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \doteq f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right)+f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$$

实际应用时，由于 x_k，A_k 可事先算出，则直接代入

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \doteq \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$$

中计算即可。

下面列出一部分 x_k，A_k 之值：

n	x_i	A_i
1	0	2.000000
2	±0.5773503	1.000000
3	0	$\frac{8}{9}=0.8888889$
	±0.7745967	$\frac{5}{9}=0.5555556$
4	±0.8611363	0.3478548
	±0.3399810	0.6521452
5	±0.9061799	0.2369269
	0	0.5688889
	±0.5384693	0.4786287

值得指出的是，在取高斯节点时，必须注意和其系数相互对应。

例　用高斯求积公式计算 $\int_1^2 \frac{1}{x}dx$

解　因 $a=-1$，$b=2$，所以由 $x=\frac{3}{2}+\frac{1}{2}t$ 得

$$
\begin{aligned}
\int_1^2 \frac{1}{x}dx &= \frac{2-1}{2}\int_{-1}^{1}\frac{1}{\frac{2+1}{2}+\frac{2-1}{2}t}dt \\
&= \frac{1}{2}\int_{-1}^{1}\frac{2}{3+t}dt \\
&= \frac{1}{2}\left[\frac{5}{9}\cdot\frac{2}{3+0.774597}+\frac{8}{9}\cdot\frac{2}{3+0}+\right. \\
&\quad \left.+\frac{5}{9}\cdot\frac{2}{3-0.774597}\right] \doteq 0.693127
\end{aligned}
$$

实际上，$I=\int_1^2 \frac{1}{x}dx=\ln x\Big|_1^2=\ln 2=0.693147\cdots\cdots$

习　题 5.6

1　用高斯公式求积分（精确到10^{-4}）。

（1）　$I=\int_0^2 \frac{1}{1+x^2}dx$。

（2）　$I=\int_0^1 \frac{\mathrm{arctg}x}{x^{\frac{3}{2}}}dx$。

（3）　$I=\int_0^1 \frac{\sqrt{x}}{(1+x)^2}dx$。

2　用高斯公式计算积分（精确到10^{-4}）。

$$I=\int_0^1 \sqrt{1+2x}\,dx$$

3　计算积分（精确到10^{-4}）。

$$I=\int_0^{\infty}\frac{dx}{(1+x)\sqrt{x}}$$

4　证明高斯系数A_k之和等于2。

5　求 t_1,t_2,B_1,B_2 及 A_1，A_2使内插求积公式

$$\int_{-1}^{1} f(t)dt=B_1f(1)+B_2f(-1)+A_1f(t_1)+A_2f(t_2)$$

具有最高代数精确度。

第六章　常微分方程数值解法

§1　引　言

在工程技术及其他很多自然科学领域中，常常会遇到微分方程的求解问题。比如求一阶常微分方程初值问题

$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dx} = f(x,y) \\ y|_{x=x_0} = y_0 \end{cases}$$

在区间 $a \leqslant x \leqslant b$ 上的解。然而，我们知道，只有少数十分简单的微分方程才能求得它们的精确解，既使求出解，也往往由于复杂和在解的表达式中含有 e^x、$\ln x$ 等初等函数值的计算，得到的仍不是准确值。多数情形只能用近似方法求其近似解。在微分方程教材中已经熟悉的级数解法、逐次逼近法等就是近似解法，这些方法可以求出解的近似表达式，称为近似解析方法。还有一类近似方法，它可以给出解在一些离散点上的近似值，通常称为数值方法。

数值方法的基本思想是：在解的存在区间上取 $N+1$ 个节点：

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots x_{n-1} < x_n < \cdots < x_N = b$$

这里差 $h_n = x_n - x_{n-1}$，称为由 x_{n-1} 到 x_n 的步长。这些 $h_n(n=1, 2, \cdots, N)$ 可以不相等，但一般取成相等的，这时 $h=\dfrac{b-a}{N}$。在这些节点上用离散化方法（通常用数值积分、数值微

分、泰勒展开等）将上述初值问题化成关于离散变量的相应问题，把这个相应问题的解y_n作为$y(x_n)$的近似值（满足规定的精度要求）。这样求得的y_n就是上述初值问题在节点x_n上的数值解。一般来说，不同的离散化导致不同的方法。利用数字电子计算机解微分方程就要使用数值方法。

本章主要研究一阶常微分方程初值问题的几个常用的数值方法（尤拉(Euler)法、龙格—库塔（Runge-Kutta）法、阿当姆斯（Adams）法）和二阶常微分方程边值问题的差分法以及有关的某些理论问题。

§2　尤拉法与改进尤拉法

（一）尤　拉　法

对常微分方程初值问题

$$\begin{cases} y' = f(x,y) & (2.1) \\ y_{x=x_0} = y_0 & (2.2) \end{cases}$$

用数值方法求解时，我们总是认为(2.1)～(2.2)的解存在且唯一。由常微分方程理论知道，应需假设$f(x,y)$在带形区域D：

$$\{a \leqslant x \leqslant b,\ -\infty < y < +\infty\}$$

内连续，且对y来说满足李普希兹条件：

$$|f(x,y^*) - f(x,y^{**})| \leqslant L|y^* - y^{**}| \tag{2.3}$$

其中(x,y^*)、(x,y^{**})为D中任意二点，L为李普希兹常数。

尤拉法是解初值问题的最简单的数值方法，它是将(2.1)写成与之等价的积分形式

$$y(x+h) = y(x) + \int_x^{x+h} f(t,y(t))dt \tag{2.4}$$

令$x = x_n$，就有

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(t,y(t))dt \tag{2.5}$$

然后，用左矩形公式计算上式右端的积分，得到

$$y(x_{n+1})=y(x_n)+hf(x_n,y(x_n))+R_{n+1} \qquad (2.6)$$

略去余项R_{n+1}，以y_n，y_{n+1}分别代替$y(x_n)$，$y(x_{n+1})$，则

$$y_{n+1}=y_n+hf(x_n,y_n),n=0,1,2,\cdots \qquad (2.7)$$

这就是尤拉法计算公式。我们称R_{n+1}为尤拉法在x_{n+1}处的局部截断误差。它表示在利用(2.7)计算y_{n+1}时方法本身的误差。由左矩形公式的余项知，

$$R_{n+1}=\frac{h^2}{2}y''(\xi_{n+1}),\quad x_n<\xi_{n+1}<x_{n+1} \qquad (2.8)$$

可以简记为$O(h^2)$。

我们知道方程(2.1)的解$y(x)$是(x,y)平面上的一族积分曲线，这族曲线上任意点的斜率为$f(x,y)$。过点(x_0,y_0)的积分曲线就是初值问题(2.1)～(2.2)的解。

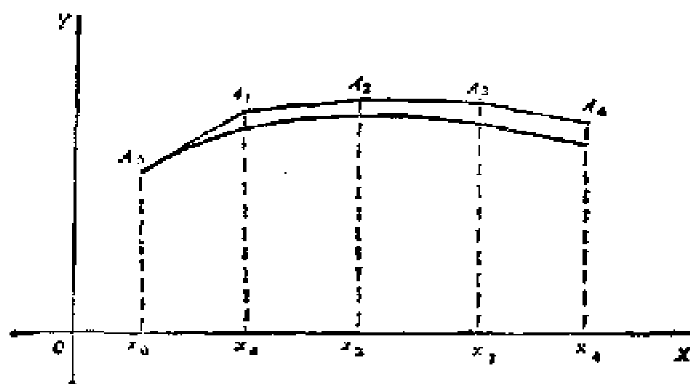


图 6.1

尤拉法的几何意义：表示解$y(x)$的曲线通过点(x_0,y_0)且引过该点以斜率为$f(x_0,y_0)$的积分曲线的切线(见图6.1)。此切线与直线$x=x_1$相交，其交点纵坐标即为y_1；再过点(x_1,y_1)作以$f(x_1,y_1)$为斜率的切线，此切线与直线$x=x_2$的交点的纵坐标为y_2，依次类推，从(x_{n-1},y_{n-1})出发，作以$f(x_{n-1},y_{n-1})$为斜率的切线，此切线与直线$x=x_n$的交点的纵坐标为y_n。将这些点分别记为A_0、A_1、A_2、$\cdots A_n$，由这些直线段按$\overline{A_0A_1}$、$\overline{A_1A_2}$、$\cdots$、$\overline{A_{n-1}A_n}$顺序连接起来，便得到一条折线。这条折线就作为所给初值问题精确解$y(x)$的近似解。因此，这种方法亦称折线法。

从(2.8)中看出，如果微分方程(2.1)～(2.2)的真解

$y=y(x)$ 为次数不超过 1 的多项式时，公式 (2.7)是精确的．所以我们亦称(2.7)为一阶方法．一般地，如果一个近似公式对所有真解$y(x)$为次数不超过 p 的多项式成立，则称为 p 阶方法．截断误差的大小标志着逼近程度的好坏。当然，我们可以认为阶数越高，逼近的程度就越好。

例1　用尤拉法求初值问题

$$\begin{cases} y' = -\dfrac{0.9}{1+2x}y & (2.9) \\ y|_{x=0} = 1 & (2.10) \end{cases}$$

当$x=0(0.02)0.10$时的数值解．此处0，0.10指积分上下限，0.02为步长。

解　把$f(x,y)=-\dfrac{0.9}{1+2x}y$ 代入尤拉法计算公式 (2.7)，就得

$$y_{n+1}=y_n-h\frac{0.9}{1+2x_n}y_n$$

$$=\left(1-\frac{0.018}{1+2x_n}\right)y_n,\quad n=0,1,2,3,4.$$

具体计算结果如下表：

n	x_n	y_n	$y(x_n)$	$\varepsilon_n=y(x_n)-y_n$
0	0	1.0000	1.0000	0
1	0.02	0.9820	0.9825	0.0005
2	0.04	0.9655	0.9660	0.0005
3	0.06	0.9489	0.9503	0.0014
4	0.08	0.9336	0.9354	0.0018
5	0.10	0.9192	0.9213	0.0021

在上表中 $y(x_n)$列，乃。是初值问题(2.9)～(2.10)的真解

$$y(x)=(1+2x)^{-0.45}$$

在 x_n 上的值，ε_n 为近似值 y_n 的误差。从表中可以看出，随着 n 的增大，误差也在增大。所以说，折线法计算简便，对一些问题有较大的使用价值。但是，它的误差较大，所得的数值解精确度不高。

（二）改进尤拉法

如果用梯形公式计算（2.5）中右端的积分，那么

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(t,y(t))dt=\frac{h}{2}\Big[f(x_n,y(x_n))+f(x_{n+1},\ y(x_{n+1}))\Big]+R_{n+1}^{(1)}$$

舍去 $R_{n+1}^{(1)}$ 后，代入（2.5）的右端，并以 y_n、y_{n+1} 分别代替 $y(x_n)$、$y(x_{n+1})$，即得：

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}[f(x_n,\ y_n)+f(x_{n+1},y_{n+1})] \tag{2.11}$$

$$n=0,1,2,\cdots,N-1.$$

上式就是改进尤拉法的计算公式。象尤拉法一样称$R_{n+1}^{(1)}$ 为改进尤拉法在x_{n+1}处的局部截断误差。如果在$[a,b]$上 $y^{(3)}(x)$存在，则

$$R_{n+1}^{(1)}=-\frac{h^3}{12}y^{(3)}(\eta_{n+1}),\ \ x_n<\eta_{n+1}<x_{n+1} \tag{2.12}$$

比较（2.8）与（2.12）可看出，尤拉法的局部截断误差比改进尤拉法的局部截断误差要大些，即当 $h\to 0$ 时前者的无穷小量比后者的低一阶。

值得注意的是，改进尤拉法的计算公式（2.11）只给出关于 y_{n+1} 的“隐式”方程，这种公式常称为隐式公式。相应地，公式（2.7）称为显式公式。

方程（2.11）通常用迭代法求解。例如，先用尤拉法公式

(2.7)求出一个值 $y_{n+1}^{(0)}$ 作为初始近似，然后再用改进尤拉法(2.11)进行迭代，直至满足精度要求为止。这时迭代公式为：

$$\begin{cases} y_{n+1}^{(0)} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_{n+1}^{(m)} = y_n + \dfrac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(m-1)})] \end{cases}$$

$$m = 1, 2, \cdots\cdots \qquad (2.13)$$

当 h 充分小时迭代程序(2.13) 是收敛的。因为$f(x,y)$ 关于 y 满足李普希兹条件，故

$$\left|y_{n+1}^{(m+1)} - y_{n+1}^{(m)}\right| = \frac{h}{2}\left|f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(m)}) - f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(m-1)})\right|$$

$$\leqslant \frac{hL}{2}\left|y_{n+1}^{(m)} - y_{n+1}^{(m-1)}\right|$$

由此可见，只要

$$\frac{hL}{2} < 1 \qquad (2.14)$$

序列$y_{n+1}^{(0)}$，$y_{n+1}^{(1)}$，$y_{n+1}^{(2)}$，$\cdots$便收敛。

因此，当 h 取得比较小时，使(2.14)成立。这就是(2.13)收敛的充分条件。

当步长 h 取得适当时，通常只需要迭代二、三次就可达到精度要求。如果迭代很多步仍不收敛，这表明步长 h 选的过大，应缩小步长后再计算。

例2 用改进尤拉法解初值问题

$$\begin{cases} y' = -\dfrac{0.9}{1+2x}y \\ y|_{x=0} = 1 \end{cases}$$

解 取$h = 0.02$，由(2.13)得

$$y_1^{(0)} = 1 - 0.02 \times \frac{0.9}{1+0} \times 1 = 0.9820$$

$$y_1^{(1)} = 1 - \frac{0.02}{2} \times \left(\frac{0.9}{1+0} \times 1 + \frac{0.9}{1+0.04} \times 0.9820\right)$$

$$= 0.9825$$

$$y_1^{(2)} = 1 - \frac{0.02}{2} \times \left(\frac{0.9}{1+0} \times 1 + \frac{0.9}{1+0.04} \times 0.9825 \right)$$

$$= 0.9825$$

$y_1^{(1)} = y_1^{(2)}$ 表明迭代收敛。

与例 1 表中的真解 $y(0.02) = 0.9825$以及尤拉法所得的数值解 $y_1 = 0.9820$ 比较，说明改进尤拉法确实精确度较高。

在引言中我们曾指出，有各种不同的离散化的途径。如果用数值微分或台劳展开式，同样可导出公式(2.7)及 (2.11)。另外，我们指出，像公式 (2.7)及 (2.11) 那样的方程，有时称为差分格式。

习 题 6.2

1 试用台劳展开式导出解 $y' = f(x,y)$，$y(x_0) = y_0$ 的尤拉法计算公式

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, \ y_n)$$

并估计其局部截断误差。

2 试导出解 $y' = f(x,y)$，$y(x_0) = y_0$ 的中点折线法：

$$y_{n+1} = y_{n-1} + 2hf(x_n, y_n)$$

并估计其局部截断误差。

3 证明：在初值问题 (2.1)～(2.2)中，若$\left|\frac{\partial f}{\partial y}\right| \leqslant M$，且$\frac{hM}{2} < 1$，则迭代法 (2.13) 是收敛的。

4 试用尤拉法与改进尤拉法求

$$y' = x + y, \qquad y(0) = 0$$

当$x = 0(0.05)0.10$时的数值解，并与真解比较。（精确到10^{-4}）。

§ 3 收敛性与稳定性

本节我们仅就尤拉法讨论微分方程数值解法的两个理论问题——收敛性和稳定性。

在用尤拉法(2.7)解初值问题的过程中，由于有截断误差，所以就有这样的问题：当步长 h 取得充分小时，(2.7)的真解 $\tilde{y}_n$（即在计算过程中不做舍入）是否能足够精确地逼近微分方程的真解 $y(x_n)$，也就是说，当$h\to 0$时，是否有 $y_n\to y(x_n)$？这个问题称为收敛性问题。

其次，由于在实际计算中，难免产生舍入误差（计算机字长有限等原因），所以就有这样的问题：在某一步上产生的误差在以后计算中是否会无限制地扩大，以致得不到所需要的数值解？如果这样，该方法是不适用的，关于这方面的问题，称为稳定性问题。

(一) 相 容 性

注意 (2.7)是 (2.4)的近似表达式，而 (2.4)是微分方程(2.1)的等价形式。因此，只有对所有满足方程 (2.1) 的函数$y(x)$，能够使表达式

$$\frac{1}{h}[y_n - y_{n+1} - hf(x_n,\ y_n)]$$

逼近于$\frac{dy}{dx}-f(x,y)$，才能期望 (2.7)的解逼近于(2.1)的解。

定义 1 解方程 (2.1)) 的差分格式称为相容的，如果它至少是一阶的。

按此定义，我们容易验证尤拉法 (2.7) 和改进尤拉法(2.11) 都是相容的方法。

（二）截断误差与收敛性

由（2.8)知，尤拉法的局部截断误差为

$$R_{n+1}=\frac{h^2}{2}y''(\xi_{n+1})=O(h^2)$$

设$\widetilde{y}_n$是在无舍入误差的情况下，用（2.7)算出的微分方程的近似解。称 $\varepsilon_n=y(x_n)-\widetilde{y}_n$为尤拉法（2.7)的**整体截断误差**。局部截断误差和整体截断误差有如下关系：

定理1 如果$f(x,y)$关于y满足李普希兹条件，且局部截断误差有界：

$$|R_n|\leqslant\frac{h^2}{2}M_2 \qquad (n=1,2,\cdots N)$$

则尤拉法的整体截断误差 ε_n 满足估计式

$$|\varepsilon_n|\leqslant e^{(b-a)L}|\varepsilon_0|+\frac{hM_2}{2L}(e^{(b-a)L}-1) \qquad (3.1)$$

其中 L 为李普希兹常数，$b-a$ 为区间长度，$M_2=\max\limits_{a\leqslant x\leqslant b}|y''(x)|$。

证明 显然$\widetilde{y}_n$满足(2.7)，即

$$\widetilde{y}_n=\widetilde{y}_{n-1}+hf(x_{n-1},\ \widetilde{y}_{n-1}) \qquad (3.2)$$

从（2.6)）减去（3.2)得到

$$\varepsilon_n=\varepsilon_{n-1}+h[f(x_{n-1},\ y(x_{n-1}))-f(x_{n-1},\ \widetilde{y}_{n-1})] +R_n \qquad (3.3)$$

利用李普希兹条件及 $|R_n|\leqslant\frac{h^2}{2}M_2$，就有

$$|\varepsilon_n|\leqslant(1+hL)|\varepsilon_{n-1}|+\frac{h^2}{2}M_2 \qquad (3.4)$$

反复利用（3.4)，则有

$$|\varepsilon_n|\leqslant(1+hL)|\varepsilon_{n-1}|+\frac{h^2}{2}M_2$$

$$\leqslant (1+hL)^2|\varepsilon_{n-2}| + \frac{h^2}{2}M_2 + (1+hL)\frac{h^2M_2}{2}$$

$$\leqslant \cdots\cdots$$

$$\leqslant (1+hL)^n|\varepsilon_0| + \frac{h^2M_2}{2}\sum_{j=0}^{n-1}(1+hL)^j$$

$$= (1+hL)^n|\varepsilon_0| + \frac{hM^2}{2L}[(1+hL)^n - 1]$$

又因为 $h=\frac{b-a}{N}$，且$x_n=a+nh\leqslant b$，从而

$$(1+hL)^n \leqslant (1+hL)^N \leqslant e^{(b-a)L}$$

于是，由$|\varepsilon_n|$的递推关系推出（3.1）。证完。

(3.1)表明尤拉法的整体截断误差由初始值的误差 ε_0 与局部截断误差界$\frac{h^2M_2}{2}$决定。若 $\varepsilon_0=0$，由（3.1）可知

$$|\varepsilon_n| = O(h)$$

即尤拉法的整体截断误差的阶与 h 同阶，而比局部截断误差的阶低一阶。

这样，当 $\varepsilon_0=0$，$h\to 0$时，$\tilde{y}_n$一致地收敛于微分方程的解 $y(x_n)$，即尤拉法是收敛的。

（三）稳 定 性

因舍入等原因， 初始值不可避免的带有误差，记为 $e_0=\tilde{y}_0-y_0$。由于初始误差的影响（传播），不可能求得（2.7)的真解，我们把（2.7)的真解记为$\tilde{y}_n$，而数值解记为 y_n（不考虑在以后计算中的舍入误差），记

$$e_n = \tilde{y}_n - y_n$$

定义 2 差分格式称为稳定的，如果对任何满足李普希兹条件的方程（2.1），存在常数 c 及 h_0，使得当 $0<h\leqslant h_0$ 时，该差分格式的任何二解满足不等式

$$|\tilde{y}_n - y_n| \leqslant c|\tilde{y}_0 - y_0| \tag{3.5}$$

其中$\tilde{y}_n$和y_n分别是由初值$\tilde{y}_0$，y_0出发，在没有舍入误差的条件下，按该法求得的。

不等式（3.5）表明，$e_n=\tilde{y}_n-y_n$连续地依赖于右端$e_0=\tilde{y}_0-y_0$。即右端变化小时，解的变化也小。显然，如果$\lim|e_0|=0$，则$\lim|e_n|=0$。由此看出，当h充分小时，解将连续地依赖于初始值。一个稳定的方法，其误差的积累可受到控制。

定理2 设$f(x,y)$在区域$\{a\leqslant x\leqslant b,-\infty<y<+\infty\}$内连续，且关于$y$满足李普希兹条件，则尤拉法是稳定的。

证明 设$\tilde{y}_n$，y_n是分别从初值$\tilde{y}_0$，y_0出发，在没有舍入误差的条件下，按尤拉法公式（2.7）求得的，即

$$\tilde{y}_n=\tilde{y}_{n-1}+hf(x_{n-1},\ \tilde{y}_{n-1})$$
$$y_n=y_{n-1}+hf(x_{n-1},\ y_{n-1})$$

从而

$$\begin{aligned}|e_n|&\leqslant|e_{n-1}|+h|f(x_{n-1},\ \tilde{y}_{n-1})-f(x_{n-1},\ y_{n-1})|\\&\leqslant(1+hL)|e_{n-1}|\end{aligned}\tag{3.6}$$

反复利用（3.6），并注意$(1+hL)^n\leqslant e^{(b-a)L}$有

$$|e_n|\leqslant e^{(b-a)L}|e_0|$$

取$c=e^{(b-a)L}$，即得条件（3.5），从而尤拉法是稳定的。

（四）绝对稳定性

在（三）中的稳定性概念，实际上是在$h\to0$的情况下讨论的，可称之为渐近稳定性（或古典稳定性）。然而，实际计算只能取有限的固定步长$\bar{h}$，它不可能随意缩小。因此，我们关心的是，对固定步长$\bar{h}$，计算过程中所产生的误差（或称摄动）对以后计算结果的影响不会步步增长的情形，即某数值方法仅仅在一个节点上$\tilde{y}_n$有大小e_n的摄动，在没有舍入误差的条件下，由此摄动而引起以后各节点$y_m(m>n)$的摄动都满足

$$|e_m|\leqslant|e_n|$$

就说这个数值方法绝对稳定。

由于舍入误差的随机性，要对差分格式的绝对稳定性做全面分析是有困难的，所以经常将问题简化，只限于考虑模型问题：

$$\begin{cases} y' = Ay \\ y(x_0) = y_0 \end{cases} \tag{3.7}$$

为了保证方法的绝对稳定，步长 h 和 A 值都要受到一定的限制。设 A 为复数，在 hA 复平面上，它们的允许范围，就称为相应方法的绝对稳定域。

例如，用尤拉法解（3.7），得

$$\widetilde{y}_{n+1} = \widetilde{y}_n + hA\widetilde{y}_n$$

而

$$y_{n+1} = y_n + hAy_n$$

故

$$\begin{aligned} e_{n+1} &= e_n + hAe_n = (1 + hA)e_n = \cdots\cdots \\ &= (1 + hA)^{n+1} e_0 \end{aligned}$$

显然，当 $|\mu_1| = |1 + hA| \leqslant 1$ 时，$|e_{n+1}| \leqslant |e_n|$。因此，满足不等式

$$|\mu_1| = |1 + hA| \leqslant 1 \tag{3.8}$$

的 hA 值就是绝对稳定域。它是以 -1 为心，以 1 为半径的圆。

象尤拉法那样，具有有限的绝对稳定域的称之为**条件稳定**。否则，便称为无条件稳定。

同理可证改进尤拉法的绝对稳定性（留给读者）。

是否所有解初值问题的差分格式都绝对稳定呢？事实不然。

例 3　讨论中点折线法

$$y_{n+1} = y_{n-1} + 2hy'_n \tag{3.9}$$

的绝对稳定性。

解　为简便计，在模型方程（3.7)中，我们取 A 为小于 0

的实数，则

$$e_{n+1}=e_{n-1}+2hAe_n \tag{3.10}$$

显然，（3.10）是关于 n 的二阶差分方程，为解方程(3.10)，令 $e_n=\lambda^n$，代入（3.10），以 λ^{n-1} 除之，移项，便得“特征方程”

$$\lambda^2-2hA\lambda-1=0$$

它的两个根分别为

$$\lambda_1=hA+\sqrt{h^2A^2+1}$$

$$\lambda_2=hA-\sqrt{h^2A^2+1}$$

从而（3.10）的通解为

$$e_n=\alpha\lambda_1{}^n+\beta\lambda_2{}^n$$

其中α、β为与 n 无关的常数，因$A<0$，故$|\lambda_1|<1$，而 $|\lambda_2|>1$。于是，当步长 h 足够小时，e_n 趋于无穷大。这就证明了(3.)是绝对不稳定的，但它是收敛的（证明略）。

图6.2 是用中点折线法解初值问题

$$y'=1-y \qquad y(0)=0 \tag{3.11}$$

的计算结果（取$h=0.1$，$y_1=1-e^{-h}$）。容易算出（3.11）的真解为 $y(x)=1-e^{-x}$，它的渐近线是 $y=1$。

从图中明显看出，所得的数值解不能近似地表示微分方程的真解，随着 x 的增大，振荡越严重。究其原因，主要是在计算过程中舍入误差的影响造成的。

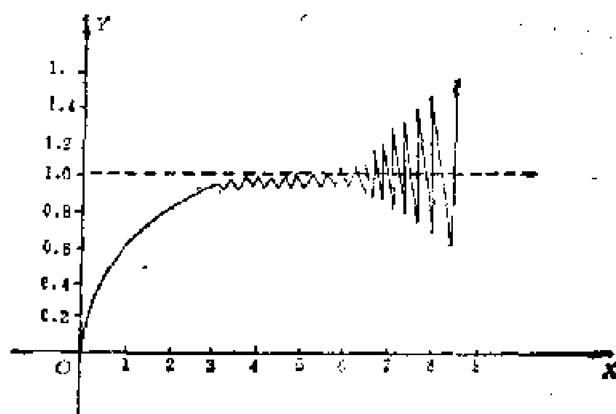


图 6.2

这个例子说明，并不是任何一个差分格式都可以求得满足精度要求的数值解，只有那些即收敛又稳定的格式才是实用的。

习　题　6.3

1 证明：若 $f(x, y)$ 关于 y 满足李普希兹条件，$y''(x)$ 存在且连续，则改进尤拉法的整体截断误差 ε_n 满足估计式

$$|\varepsilon_n| \leqslant e^{2(b-a)L}|\varepsilon_0| + \frac{h^2 M_3}{12L}(e^{2(b-a)L} - 1)$$

其中 L 为李普希兹常数，$M_3 = \max\limits_{a \leqslant x \leqslant b}|y'''(x)|$

2　对初值问题

$$y' + y = 0,\quad y(0) = 1$$

证明用改进尤拉公式（2.11）所求得的近似解为

$$y(nh) \doteq y_n = \left(\frac{2-h}{2+h}\right)^n \qquad (x = nh)$$

并证明当 $h \to 0$ 时，它收敛于精确解 e^{-x}。

3　讨论改进尤拉法的绝对稳定性。

§4　龙格—库塔法

由上节知道，截断误差的阶是衡量一个方法精度高低的主要依据．能否用提高截断误差阶来提高方法的精确度呢？回答是肯定的．本节介绍的泰勒级数法和龙格——库塔法，就是基于这种思想构造出来的．

（一）泰勒级数法

如果初值问题（2.1）～（2.2）的真解 $y(x)$ 在$[x_0, x]$上存在 $p+1$ 阶导数且连续，即$y(x) \in C^{p+1}$，那么由台劳公式知

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + hy'(x_n) + \cdots + \frac{h^p}{p!}y^{(p)}(x_n) + R_p \qquad (4.1)$$

其中截断误差为

$$R_p=\frac{h^{p+1}}{(p+1)!}y^{(p+1)}(\xi)=O(h^{p+1}),\quad x_n<\xi<x_{n+1}\tag{4.2}$$

在（4.1)中略去截断误差，并以近似值$y_n^{(k)}$代替真值$y^{(k)}(x_n)$，则得

$$y_{n+1}=y_n+hy'_n+\frac{h^2}{2!}y''_n+\cdots+\frac{h^p}{p!}y_n^{(p)}\tag{4.3}$$

用公式（4.3）解（2.1)～（2.2）的数值方法称为**泰勒级数法**（**或称泰勒展开法**）．当$p=3$时，（4.3)变为

$$y_{n+1}=y_n+hy'_n+\frac{h^2}{2}y''_n+\frac{h^3}{6}y'''_n\tag{4.4}$$

此时截断误差（4.2)为

$$R_3=\frac{h^{3+1}}{(3+1)!}y^{(4)}(\xi)=O(h^4),\quad x_n<\xi<x_{n+1}\tag{4.5}$$

从截断误差的表示式中看出，如果微分方程（2.1)的真解$y=y(x)$为次数不超过3的多项式，公式（4.4)精确成立，因此（4.4)是三阶方法．

例4　导出用三阶泰勒级数法解方程

$$y'=x^2+y^2$$

的计算公式．

解　将

$$y'=f(x,y)=x^2+y^2$$

$$y''=f'=2x+2yy'=2x+2y(x^2+y^2)$$

$$y'''=f''=2+2yy''+2(y')^2=2+4xy+2(x^2+y^2)(x^2+3y^2),$$

$$y^{(4)}=f'''=2yy'''+2y'y''+4y'y''=2yy'''+6y'y''=4y+4x(3x^2+5y^2)+8y(x^2+y^2)(2x^2+3y^2)$$

代入（4.3），得

$$y_{n+1}=y_n+hf_n+\frac{1}{2}h^2f'_n+\frac{1}{6}h^3f''_n$$

而

$$R_3=\frac{h^4}{4!}f'''_n(\xi), \qquad x_n<\xi<x_{n+1}$$

其中$f_n^{(k)}$表示$f(x,y)$对x的k阶偏导数在$x=x_n$点的值。

泰勒级数法只要初值问题的真解充分光滑，就可以获得精确度较高的数值解。但是须计算$y(x)$的各阶导数．这当$f(x, y)$的表示式复杂时，是很繁琐的，因此泰勒级数法一般只用于求"表头"（即开头几点的数值解，如y_1，y_2，y_3，y_4等）。另外，用上述级数法计算"表头"时，还可以得到选择步长h的信息。假定我们要求计算误差不超过ε，那么，当h满足条件

$$\frac{1}{(p+1)!}h^{p+1}|y^{(p+1)}(x_n)|\leqslant\varepsilon \qquad (A)$$

$$\frac{1}{p!}h^p|y^{(p)}(x_n)|>\varepsilon \qquad (B)$$

时，应认为是最好的。因为，当条件（A）不满足时，达不到指定精确度，而当条件（B）不满足时，则表明h过小。

为了简化计算，我们自然会想到，能否构造一种格式，既保留泰勒级数法精确度较高的优点，又避免过多的计算$f(x, y)$的各阶偏导数呢？下面介绍的龙格—库塔法就能办到这一点。

（二）龙格——库塔法

从理论上讲，只要函数$y=y(x)$在区间$[a, b]$上充分光滑，那么它的各阶导数值$y^{(k)}(x_n)$与函数$y(x)$在区间$[a, b]$上某些点的值就相互有联系，就是说，函数值可用各阶导数值近似地表示出来。反之，各阶导数值也可用函数在一些点上值的线性结合近似地表示出来。事实上，尤拉法和改进尤拉法也可

看成是函数值用导数值的线性结合表示的特例．例如，改进尤拉法公式（2.13）可改写成如下形式：

$$
\begin{aligned}
&y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}(k_1+k_2)\\
&k_1=f(x_n,y_n) \qquad\qquad (4.6)\\
&k_2=f(x_{n+1},y_n+hk_1)
\end{aligned}
$$

此公式也可称为**二阶龙格——库塔公式**．

为了导出龙格——库塔法的一般公式，我们取如下的线性结合形式，

$$y_{n+1}=y_n+h\sum_{i=1}^{\nu}w_ik_i \qquad (4.7)$$

其中

$$k_i=f(x_n+b_ih,\ y_n+h\sum_{j=1}^{i-1}a_{ij}k_j) \qquad (4.8)$$

即

$$
\begin{cases}
k_1=f(x_n,\ y_n)\\
k_2=f(x_n+b_2h,\ y_n+ha_{21}k_1)\\
k_3=f(x_n+b_3h,\ y_n+ha_{31}k_1+ha_{32}k_2)\\
\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots
\end{cases}
$$

而 $w_1, w_2,\cdots,w_\nu;b_1=0,b_2,b_3,\cdots,b_\nu;a_{21},a_{31},\cdots,a_{\nu\,\nu-1}$ 除 $b_1=0$ 外均为待定系数．适当选取这些系数，使得局部截断误差的阶尽可能提高即可．

显然，当 $\nu=1$时，（4.7）式就是尤拉公式．

下面我们先导出$\nu=2$时，即二阶龙格——库塔公式．首先将k_1，k_2在同一点(x_n, y_n)泰勒展开，则有

$$
\begin{aligned}
&k_1=f(x_n,y_n)\\
&k_2=f(x_n,y_n)+h\left(b_2\cdot\frac{\partial f}{\partial x}\bigg|_{(x_n,y_n)}+\right.\\
&\qquad\left.+a_{21}\cdot f_n\cdot\frac{\partial f}{\partial y}\bigg|_{(x_n,y_n)}\right)+O(h^2) \qquad (4.9)
\end{aligned}
$$

将（4.9）代入（4.7）并与 $y(x_n+h)$在 x_n 点的泰勒展开式：

$$
\begin{aligned}
y(x_n-h) = {} & y(x_n) + hf(x_n,y_n) + \frac{h^2}{2!}\left(\frac{\partial f}{\partial x}\bigg|_{(x_n,y_n)} +\right. \\
& \left. + f(x_n,y_n)\cdot\frac{\partial f}{\partial y}\bigg|_{(x_n,\ y_n)}\right) + \\
& + \frac{h^3}{3!}\left[\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\bigg|_{(x_n,y_n)} + \right. \\
& + 2f(x_n,y_n)\cdot\frac{\partial^2 f}{\partial x\partial y}\bigg|_{(x_n,y_n)} + \\
& + f^2(x_n,y_n)\cdot\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}\bigg|_{(x_n,y_n)} + \\
& + \frac{\partial f}{\partial y}\bigg|_{(x_n,\ y_n)}\left(\frac{\partial f}{\partial x}\bigg|_{(x_n,y_n)} + \right. \\
& \left.\left. + f(x_n,y_n)\frac{\partial f}{\partial y}\bigg|_{(x_n,y_n)}\right)\right] + \cdots
\end{aligned}
$$

逐项比较，欲使方法为二阶的，则令 h，h^2 项的系数相等，便得到，

$$
\begin{cases}
W_1 + W_2 = 1 \\
W_2 b_2 = \dfrac{1}{2} \\
W_2 a_{21} = \dfrac{1}{2}
\end{cases}
$$

把 b_2 作为自由参数来确定 W_1 和 W_2，如取 $b_2=1$，则得

$$W_1 = W_2 = \frac{1}{2}$$

$$a_{21} = 1$$

这时（4.7)正好就是改进尤拉法（2.13），局部截断误差的阶为$O(h^3)$，显然二阶龙格——库塔公式不是唯一的。

对于 $\nu=3$ 的情形，我们也可以完全仿上述方法推导出三阶龙格——库塔公式。这时参数满足下列条件：

$$
\begin{cases}
W_1+W_2+W_3=1 \\
b_2W_2+b_3W_3=\frac{1}{2} \\
a_{21}W_2+(a_{31}+a_{32})W_3=\frac{1}{2} \\
b_2^2W_2+b_3^2W_3=\frac{1}{3} \\
b_2a_{21}W_2+b_2(a_{31}+a_{32})W_3=\frac{1}{3} \\
a_{21}^2W_2+(a_{31}+a_{32})^2W_3=\frac{1}{3} \\
b_2a_{32}W_2=\frac{1}{6} \\
a_{21}a_{32}W_3=\frac{1}{6}
\end{cases}
\tag{4.10}
$$

(4.10) 的比较简单的一组解为:

$$b_2=\frac{1}{2},\quad b_3=1,$$

$$a_{21}=\frac{1}{2},\quad a_{31}=-1,a_{32}=2,$$

$$W_1=\frac{1}{6},\quad W_2=\frac{2}{3},\quad W_3=\frac{1}{6}$$

将它代入 (4.7) 得

$$
\begin{cases}
y_{n+1}=y_n+\frac{h}{6}(k_1+4k_2+k_3) \\
k_1=f(x_n,\ y_n) \\
k_2=f\left(x_n+\frac{h}{2},\ y_n+\frac{hk_1}{2}\right) \\
k_3=f(x_n+h,\ y_n-hk_1+2hk_2)
\end{cases}
\tag{4.11}
$$

这就是三阶龙格——库塔公式. 当然参数的不同选取, 公式 (4.11) 就有不一样的形式, 但它们的局部截断误差的阶都是 $O(h^4)$.

通常人们所说的龙格——库塔法是指四阶而言的. 我们可

以仿照二阶的情形推导出此公式，不过太繁杂，此处从略。常用的四阶公式是

$$
\begin{cases}
y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\
k_1 = f(x_n, y_n) \\
k_2 = f\left(x_n + \dfrac{1}{2}h,\quad y_n + \dfrac{h}{2}k_1\right) \\
k_3 = f\left(x_n + \dfrac{1}{2}h,\quad y_n + \dfrac{h}{2}k_2\right) \\
k_4 = f(x_n + h, y_n + hk_3)
\end{cases}
\tag{4.12}
$$

公式（4.12）的局部截断误差的阶为 $O(h^5)$.

龙格——库塔法有精确度较高，收敛、稳定（在一定的条件下），计算过程中可以改变步长，不需要计算高阶导数值等优点．但仍需要计算 $f(x, y)$ 在一些点的值，如四阶龙格—库塔法每计算一步需要算四次 $f(x, y)$ 的值，这仍会给实际计算带来一定的复杂性．因此，它与泰勒级数法一样，一般用于计算“表头”．

例 5 用四阶龙格——库塔法解初值问题

$$
y' = x^2 - y \qquad (0 \leqslant x \leqslant 1), \qquad y(0) = 1 \tag{4.13}
$$

解 取$h = 0.1$，由(4.12)得

$$
\begin{cases}
k_1 = x_n^2 - y_n \\
k_2 = (x_n + 0.05)^2 - (y_n + 0.05k_1) \\
k_3 = (x_n + 0.05)^2 - (y_n + 0.05k_2) \\
k_4 = (x_n + 0.1)^2 - (y_n + 0.1k_3)
\end{cases}
\tag{4.14}
$$

把初始条件 $x_0 = 0$，$y_0 = 1$，代入(4.14)，得

$$k_1 = -1$$

$$k_2 = 0.9475$$

$$k_3 = -0.9501$$

$$k_4 = -0.8950$$

将这些k值代入（4.12）得

$$y_1=1+\frac{0.1}{6}[-1+2(-0.9475-0.9501)-0.8950]$$

$$=0.90516$$

重复上述步骤可算出y_2，y_3，…，y_{10}等。

前面介绍的所有方法，统称为单步法，就是在计算y_{n+1}时，只用到前面一步y_n的值。下节我们将介绍用前边已经算出来的若干个值，y_{n-k}，$y_{n-(k-1)}$，…，y_{n-1}，y_n来求得y_{n+1}的高精度公式——线性多步方法。

习　　题　6.4

1　用四阶龙格——库塔法解初值问题，并与其真解比较（取小数点后四位），

$$y'=x+y,\ y(0)=0,\ x=0(0.1)0.2$$

2　用四阶龙格——库塔法解下初值问题，

$$y'=x^2+x^3y,\ y(1)=1,\ x=1.0(0.1)1.3$$

3　对例4求出y_2，y_3。

§5　线性多步法

我们仍考虑一阶常微分方程初值问题

$$\begin{cases} y'(x)=f(x,\ y) \\ y(x_0)=y_0 \end{cases} \tag{5.1}$$

它可化成等价的积分形式

$$\begin{cases} y(x_{n+1})=y(x_n)+\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x,\ y)dx \\ y(x_0)=y_0 \end{cases} \tag{5.2}$$

假定已按某种方法（如尤拉法、泰勒级数法、龙格—库塔法

等）算出 y_{n-k}，…，y_{n-1}，y_n，从而 $f_{n-k},\cdots,f_{n-1}$，f_n 也已知。

如何利用它们来计算y_{n+1}呢？

其具体作法是，首先用这 $k+1$个值作（5.2）右端被积函数$f(x,y)$的插值多项式$P_k(x)$，以 $r_k(x)$ 表示相应的插值余项，则

$$y'(x)=p_k(x)+r_k(x)$$

从而

$$y(x_{n+1})=y(x_n)+\int_{x_n}^{x_{n+1}} p_k(x)dx$$

$$+\int_{x_n}^{x_{n+1}} r_k(x)dx \tag{5.3}$$

在上式中舍去余项

$$R_k(x)=\int_{x_n}^{x_{n+1}} r_n(x)dx \tag{5.4}$$

并用 y_i 代替 $y(x_i)$，算得的结果作为 $y(x_{n+1})$的近似值 y_{n+1}，于是便得线性多步法的计算公式

$$y_{n+1}=y_n+\int_{x_n}^{x_{n+1}} p_k(x)dx \tag{5.5}$$

这样，选取不同类型的插值多项式，便得到不同的公式。

（一）阿达姆斯外推法

为了简单起见，我们以 $k=2$ 为例导出阿达姆斯外推公式。它是以 x_{n-2}，x_{n-1}，x_n 为节点作牛顿后插多项式，

$$p_2(x)=f_n+t\nabla f_n+\frac{t(t+1)}{2!}\nabla^2 f_n \tag{5.6}$$

其中

$$t=\frac{x-x_n}{h}$$

而余项为

$$r_2(x)=\frac{h^3t(t+1)(t+2)}{3!}y^{(4)}(\xi)$$

$$(x_{n-2}<\xi<x_n \tag{5.7}$$

将（5.6)代入（5.5)式并经变量替换 $x=x_n+th$，便得

$$y_{n+1}=y_n+h\int_0^1 f_n+t\nabla f_n+\frac{t(t+1)}{2!}\nabla^2 f_n)dt$$

$$=y_n+h(f_n+\frac{1}{2}\nabla f_n+\frac{5}{12}\nabla^2 f_n) \tag{5.8}$$

在上述公式中被插值点 $x_n\leqslant x\leqslant x_{n+1}$ 不包含在插值节点所决定的最大区间（x_{n-2}，x_n)内，故(5.8)称为阿达姆斯外推公式（或称外插公式），显然，它是显式的，且每前进一步只计算一次$f(x,y)$的值即可.

公式(5.8)的局部截断误差由(5.4)及(5.7）利用积分第一中值定理得

$$R_{n+1}=h^4\int_0^1\frac{t(t+1)(t+2)}{3!}y^{(4)}(\xi)dt$$

$$=O(h^4),\qquad x_{n-2}<\xi<x_n \tag{5.9}$$

上式表明阿达姆斯外推法（当$k=2$时）的局部截断误差的阶为$O(h^4)$.

同理，对$k=3$的情形类似地可求得外推公式

$$y_{n+1}=y_n+h(f_n+\frac{1}{2}\nabla f_n+\frac{5}{12}\nabla^2 f_n+\frac{3}{8}\nabla^3 f_n) \tag{5.10}$$

而余项为

$$R_{n+1}=\frac{251}{720}h^5y^{(5)}(\xi)=O(h^5),x_{n-3}<\xi<x_n \tag{5.11}$$

公式(5.8)及（5.10）在台式机上计算是方便的，但不便于在电子计算机上实现，因为它须要输入一个差分表．为此，我们将差分表示成函数值的代数和形式，即

$$\nabla^j f_n = \sum_{i=0}^{j} (-1)^i C_j^i f_{n-i} \tag{5.12}$$

其中 C_j^i 是组合数,

$$C_j^i = \frac{j(j-1)\cdots(j-i+1)}{i!}$$

$$C_j^0 = 1$$

这样,(5.8) 可改写为

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}(23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2}) \tag{5.13}$$

而 (5.10) 可改写为

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}(55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}) \tag{5.14}$$

公式 (5.13) 和 (5.14) 是常用的外推公式.

同理可推出一般的阿达姆斯外推公式,但没有多大实用价值,故不介绍了.

同时,可以证明阿达姆斯外推公式是稳定的.

例 6 求 $y' = x + y$, $y(0) = 1$, 当 $x = 0(0.1)0.5$ 时的数值解.

解 先用前面讲过的方法计算出表头

$y_0 = 1$, $y_1 = 1.11034$,

$y_2 = 1.24281$, $y_3 = 1.39972$.

将上述值代入公式 (5.14),计算得

$y_4 = 1.58364$, $y_5 = 1.79742$

(二) 阿达姆斯内插法

根据插值理论知道,节点的选择对于精度有直接影响,同样次数的内插公式比外插公式更精确.

如果 (5.5)中的被积函数是以 x_{n-1}, x_n, x_{n+1} 为插值节点的内插多项式,即

$$p_2(x)=f_{n+1}+t\nabla f_{n+1}+\frac{t(t+1)}{2!}\nabla^2 f_{n+1} \qquad (5.15)$$

将(5.15) 代入 (5.5)便得

$$y_{n+1}=y_n+h(f_{n+1}-\frac{1}{2}\nabla f_{n+1}-\frac{1}{12}\nabla^2 f_{n+1}) \qquad (5.16)$$

把它改写成便于在电子计算机上实现的形式，就有

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{12}(5f_{n+1}+8f_n-f_{n-1}) \qquad (5.17)$$

上式便是 $k=1$ 时的阿达姆斯内插公式，它的局部截断误差的阶为

$$R_{n+1}=O(h^4) \qquad (5.18)$$

同理，对 $k=2$ 的情形可导出公式

$$y_{n+1}=y_n+h(f_{n+1}-\frac{1}{2}\nabla f_{n+1}-\frac{1}{12}\nabla^2 f_{n+1}-\frac{1}{24}\nabla^3 f_{n+1}) \qquad (5.19)$$

或

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{24}(9f_{n+1}+19f_n-5f_{n-1}+f_{n-2}) \qquad (5.20)$$

而

$$R_{n+1}=O(h^5) \qquad (5.21)$$

这就是常用的阿达姆斯内插公式。

比较外推法与内插法的局部截断误差可知，在同样利用 $k+1$ 个已知值时，阿达姆斯内插法的局部截断误差的阶比外推法高一阶，因而内插法更精确。

但内插法 (5.17) 及 (5.20) 是隐式的，需要解方程，通常用迭代法求解。如，用外推法 (5.13) 算出的值作为初始近似，然后用相应地内插法公式 (5.20) 进行迭代，即

$$\begin{cases} y_{n+1}^{(0)}=y_n+\frac{h}{12}(23f_n-16f_{n-1}+5f_{n-2}) \\ y_{n+1}^{(m+1)}=y_n+\frac{h}{24}[9f(x_{n+1},\ x_{n+1}^{(m)})+19f_n-5f_{n-1} \end{cases}$$

$$+f_{n-2}] \qquad (5.22)$$

若将(5.20)记成$y_{n+1}=F(y_{n+1})$的形式，容易算出

$$\frac{dF(y_{n+1})}{dy_{n+1}}=\frac{9}{24}h\frac{\partial f(x_{n+1},y_{n+1})}{\partial y_{n+1}}$$

因此，当h充分小时，可有

$$\left|\frac{dF(y_{n+1})}{dy_{n+1}}\right|=\frac{3}{8}h\left|\frac{\partial f(x_{n+1},y_{n+1})}{\partial y_{n+1}}\right|<1$$

即迭代程序（5.22）收敛，并且h愈小，收敛愈快。当h选得适当时，一般迭代二、三次即可得到满足精度要求的y_{n+1}值。

同理可导出一般的阿达姆斯内插公式，但由于没有多大实用价值在此不介绍了。

最后，我们指出，如果在讨论的区域内，$f_y<0$，则阿达姆斯方法是稳定的。

为了提高精度，经常把阿达姆斯外推法与内插法联合起来交替使用

例如

$$\begin{cases} y_{n+1}^{(0)}=y_n+\dfrac{h}{12}(23f_n-16_{n-1}+5f_{n-2}) \\ y_{n+1}=y_n+\dfrac{h}{24}[9f(x_{n+1},\ y_{n+1}^{(0)})19f_n- \\ \qquad -5f_{n-1}+f_{n-2}] \end{cases}$$

第一个方程的精度为$O(h^4)$。用第二个方程迭代一次精度仍可达到$O(h^5)$。这样两个方程交替使用可达到较好的效果。这种数值方法称为**预估校正法**。第一个方程是预估方程，第二个方程是校正方程。当然把尤拉法和改进尤拉法联合起来，交替使用，也构成一种预估校正法，也是很实用的。

例7　对例5用内插法求解。

解　先用前面讲过的方法计算出表头

$y_0=1$；$y_1=1.11034$；$y_2=1.24281$

再用(5.22)的第一个式子计算出$y_3^{(0)}=1.39964$，最后用(5.22)的第二个式子进行迭代，得

$$y_3=1.39972.$$

同样，可算出 y_4 及 y_5。

习　题 6.5

1　下题先用第六章§4的方法求表头，然后用阿达姆斯外推法继续求以后各值：

$$y'=2x-y,\ \ y(1)=3,\ \ x=1(0.1)1.4$$

2　对初值问题，

$$y'=-y(1+xy),\ \ y(0)=1,\ \ 0\leqslant x\leqslant 1$$

用阿达姆斯内插法求解时，如何选取步长 h，使迭代法收敛呢？

§6　解二阶常微分方程边值问题的差分法

在结构力学、两点热传导理论等实际问题中，经常需要解常微分方程的边值问题：

$$\begin{cases} y''+p(x)y'+q(x)y=f(x) & a<x<b \\ y(a)=\alpha \quad y(b)=\beta \end{cases} \tag{6.1}$$

其中 $p(x)$，$q(x)$和 $f(x)$均为$[a,b]$上给定的函数，α、β 为已知数。

边值问题的主要特点是在两个端点上给出了定解条件。在以下的讨论中我们总假定 $p(x)$，$q(x)$ 及 $f(x)$ 均为$[a,b]$上充分光滑的函数，且 $q(x)\leqslant 0$。这时，边值问题(6.1)存在连续可微的解，且唯一。

差分方法是解边值问题的一种最基本的方法。

用差分法解边值问题的主要步骤是

（1）将区间$[a,b]$“离散化”；

（2）在这些节点上，将导数用差商代替，从而把微分方程化为差分方程；

（3）解差分方程——实际上就是解线性代数方程组。

今将$[a,b]$区间用节点

$$x_i = a + ih, \quad i = 0, 1, \cdots N, \ h = \frac{b-a}{N}$$

分成N等分，其中$x_0 = a$与$x_N = b$称为边界点，而x_1，x_2，…，x_{N-1}称为内点。

再将$y''(x)$，$y'(x)$在内点x_i处的值，用$y(x)$在x_i及其邻点上的值来表出。由第四章§7知

$$\frac{y(x_{i+1}) - y(x_{i-1})}{2h} = y'(x_i) + O(h^2) \tag{6.2}$$

$$\frac{y(x_{i+1}) - 2y(x_i) + y(x_{i-1})}{h^2} = y''(x_i) + O(h^2) \tag{6.3}$$

略去上式中截断误差$O(h^2)$，并以近似值y_i代替真值$y(x_i)$，便得

$$y(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - y_i}{2h} \qquad \text{（一阶中心差商）}$$

$$y''(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} \qquad \text{（二阶中心差商）}$$

用一、二阶中心差商分别代替(6.1)中的一、二阶导数，则得逼近(6.1)的差分方程

$$\begin{cases} \dfrac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + p_i \dfrac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} + q_i y_i = f_i \\ y_0 = \alpha, \ y_N = \beta, \ i = 1, 2, \cdots N-1 \end{cases} \tag{6.4}$$

其中$p_i = p(x_i)$，$q_i = q(x_i)$ $f_i = f(x_i)$。经过简单整理，(6.4)可改写成

$$\begin{cases} (1-\frac{h}{2}p_i)y_{i-1}-2(1-\frac{h^2}{2}q_i)y_i \\ \qquad +(1+\frac{h}{2}p_i)y_{i+1}=h^2f_i \\ y_0=\alpha,\ y_N=\beta,\ i=1,2,\cdots,N-1 \end{cases} \tag{6.5}$$

差分方程（6. 5）实际上是含$N-1$个未知数 $y_1,y_2,\cdots,y_{N-1}$ 的线性代数方程组。

最后，解差分方程（6.5），就可得数值解 y_i，为此，令

$$a_i=1-\frac{h}{2}p_i,\quad b_i=-2(1-\frac{h^2}{2}q_i)$$

$$c_i=1+\frac{h}{2}p_i,\ d_i=h^2f_i \tag{6.6}$$

则有

$$\begin{cases} b_1y_1+c_1y_2 & =d_1-a_1 \\ a_2y_1+b_2y_2+c_2y_3 & =d_2 \\ \qquad a_3y_2+b_3y_3+c_3y_4 & =d_3 \\ \qquad\qquad \vdots & \ \vdots \\ \qquad a_{N-1}y_{N-2}+b_{N-1}y_{N-1} & =d_{N-1}-c_{N-1}\beta \end{cases} \tag{6.7}$$

这个方程组的系数矩阵是三对角线的，可以用追赶法求解。

现在还有两个问题必须予以回答，其一是差分方程(6.5)的解（也即线性代数方程组(6.7）的解）是否存在且唯一；其二是差分方程(6.5）的真解，当 $h\to0$ 时，是否收敛于微分方程(6.1）的真解。

下面我们给出(6.5）有唯一解且收敛于(6.1）的条件。

定理 若

$$a_i>0,\ c_i>0,\ -b_i\geqslant a_i+c_i+\rho_i\quad(\rho_i>0) \tag{6.8}$$

其中 $i=1,2,\cdots,N-1$,则二阶差分方程

$$\begin{cases} a_iy_{i-1}+b_iy_i+c_iy_{i+1}=d_i \\ y_0=\alpha,\ y_N=\beta,\ n=1,2,\cdots,N-1 \end{cases} \tag{6.9}$$

有唯一解，且当 $h\to0$ 时收敛于相应微分方程的真解。

如果 $q(x)<0$，由(6.6) 知 $\rho_i=-h^2q_i>0$，故差分方程(6.5) 满足定理条件．容易看出，若(6.8) 成立，则由第三章§5引理知，方程组(6.7) 存在唯一解，即(6.5) 存在唯一解．收敛性证明见§7.2.值得注意的是(6.8) 只是一个充分条件．

例 8　试用差分法解方程

$$\begin{cases} y''-2(9x+2)y=-2(9x+2)e^x(0<x<1) \\ y(0)=0,\ y(1)=1 \end{cases} \tag{6.10}$$

解　将[0，1]划分为四等分，即取 $h=\frac{1}{4}$，得五个节点

$$x_0=0,\quad x_1=\frac{1}{4},\ x_2=\frac{1}{2},\ x_3=\frac{3}{4},\ x_4=1$$

仿(6.4) 导出(6.10)的差分方程

$$\begin{cases} \dfrac{y_{i-1}-2y_i+y_{i+1}}{h^2}-2(9x_i+2)y_i \\ \qquad\qquad =-2(9x_i+2)e^{x_i} \\ y_0=0,\ y_4=1,\quad i=1,2,3 \end{cases} \tag{6.11}$$

将它改写成

$$\begin{cases} y_{i-1}-2[(1+h^2\ (9x_i+2)\ ]y_i+y_{i+1} \\ \qquad\qquad =-2h^2(9x_i+2)e^{x_i} \\ y_0=0,\ y_4=1, \end{cases} \tag{6.12}$$

根据定理，此处 $a_i=c_i=1$，$b_i=-2[1+h^2(9x_i+2)]$，$\rho_i=2h^2(9x_i+2)>0$，便知满足定理条件．故二阶差分方程(6.12) 有唯一解且是收敛的．

在每一个内点列方程得

$$\begin{cases} -2.5312y_1+y_2 \qquad\qquad\qquad =-0.6821 \\ \qquad y_1-2.8125y_2+y_3 \quad =-1.3396 \\ \qquad\qquad y_2-3.0938y_3=-3.3156 \end{cases} \tag{6.13}$$

由追赶法递推公式，得

$$\eta_1=-0.6821,\ \eta_2=-1.6091,\ \eta_3=-3.9813$$

$$y_3=1.4855,\ y_2=1.2801,\ y_1=0.7752$$

习　题 6.6

1　用差分法求方程

$$y''-y=0,\quad y(0)=0,\quad y(1)=1$$

的数值解($h=0.2$)。

2　求方程

$$y''-(1+x^2)y=-1,\quad y(-1)=y(1)=0$$

的数值解（取 $h=0.5$）。

第七章 偏微分方程数值解法

在实际应用中，通常从工程技术和科学实验中提出的大量偏微分方程要求其精确解，一般来讲这是一个十分困难的问题，因此引进数值方法求其数值解就显得很必要.

本章主要针对几个典型的微分方程介绍常用的差分方法和有限元方法. 这些方法基本思想是：把一个连续问题离散化，通过各种手法化成有限形式的线性方程组，然后求其解.

§1 差分法简介

差分法是求偏微分方程数值解的重要方法之一，它的主要做法是把偏微分方程中所有偏导数分别用差商代替，从而得到一代数方程组——差分方程，然后对差分方程求解，并以所得的解作为偏微分方程数值解.

为此，必须对区域进行剖分，用网格点来代替连续区域，因此差分法亦称"网格法".

我们用一个简单例子来说明差分法的基本思想和具体要求.

取一边长为1的正方形均匀薄板，上下侧面绝热，四周保持恒温(如图7·1)，求板内各点的稳定温度分布.

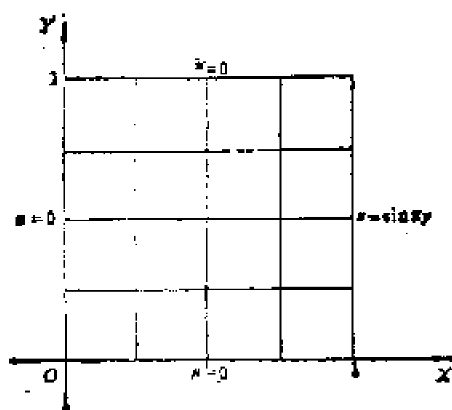


图7.1

这个问题如在数学物理方程中所知，它可以化为拉普拉斯方程第一边值问题：

$$
\begin{cases}
\Delta u = \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \quad (\Omega: 0<x<1, 0<y<1) \\
u|_{x=0} = u|_{y=0} = u|_{y=1} = 0 \\
u|_{x=1} = \sin \pi y
\end{cases}
\quad (1.1)
$$

一般的来说对这类问题我们是无法求出解的解析表达式，有的即便能求出也是很复杂的，在实际问题中往往也并不需要求出u在区域Ω内每一点值，实际上能求出在区域内某些点的近似值也就满足需要了。

在图7.1中作平行于坐标轴间隔为h（$=\frac{1}{4}$）的两族直线，我们求u在网格点（落在Ω内两族直线的交点）上的值，并且以后采用下列记号：

$$(x_i, y_k) = (ih, kh), \quad u(x_i, y_k) = u(i, k)$$

我们利用u在这些点满足方程

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{ik} + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)_{ik} = 0 \quad (1.2)$$

求出u在网格点上的值，（1.2）中（ ）$_{ik}$表示u在(i,k)点上的值。

从方程（1.2）中是无法直接求出u值，而我们求出u在网格点上的近似值也就可以了，为此，和常微分方程的差分方法一样，将（1.2）中偏导数用差商代替，则有

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{ik} \doteq \frac{u(i-1,k) - 2u(i,k) + u(i+1,k)}{h^2} \quad (1.3)$$

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)_{ik} \doteq \frac{u(i,k+1) - 2u(i,k) + u(i,k-1)}{h^2} \quad (1.4)$$

于是就得到$u(i,k)$的近似值u_{ik}，所满足的线性代数方程组：

$$\frac{1}{h^2}(u_{i+1,k} + u_{i-1,k} + u_{i,k+1} + u_{i,k-1} - 4u_{ik}) = 0 \quad (1.5)$$

其中$u_{0k} = u_{i0} = u_{i4} = 0$ $(k, i = 1, 2, 3)$，

$$u_{4;k}=\sin k\pi/4=\begin{cases}0.707 & k=1\\ 1 & k=2\\ 0.707 & k=3\end{cases}$$

用迭代法来解方程组（1.5）. 首先将方程组（1.5）化成迭代形式

$$u_{ik}=\frac{1}{4}(u_{i+1;k}+u_{i-1;k}+u_{i;k+1}+u_{i;k-1}) \quad (1.6)$$

然后用下边方法取初始值.

先用线性插值，注意边界条件 $(u|_{x=0}=u|_{t=0}=u|_{t=1}=0)$ 给定区域内部的四个网格点的值（表7.1），然后再用（1.6）算出其余五个网格点的值，则得到初始值，如表7.2.

计算 $u_{ik}^{(1)}$ 时可将（1.6）写成简单迭代形式：

$$u_{ik}^{(n+1)}=\frac{1}{4}(u_{i+1;k}^{(n)}+u_{i-1;k}^{(n)}+u_{i;k+1}^{(n)}+u_{i;k-1}^{(n)})$$

然后，用（表7.2）中初始值进行计算.

表7.1

$i=0$	$i=1$	$i=2$	$i=3$	$i=4$	
0	0	0	0	0	$k=4$
0	0	0.354	0	0.707	$k=3$
0	0.25	0	0.75	1	$k=2$
0	0	0.354	0	0.707	$k=1$
0	0	0	0	0	$k=0$

表7.2

0	0	0	0	0
0	0.151	0.354	0.453	0.707
0	0.25	0.427	0.75	1
0	0.151	0.354	0.453	0.707
0	0	0	0	0

$u(0)$

表7.3

0	0	0	0	0
0	0.151	0.258	0.453	0.707
0	0.182	0.427	0.583	1
0	0.151	0.258	0.453	0.707
0	0	0	0	0

$u(1)$（简单迭代）

表7.4

0	0	0	0	0
0	0.134	0.243	0.381	0.707
0	0.182	0.386	0.573	1
0	0.151	0.258	0.453	0.707
0	0	0	0	0

$u(1)$（采德尔迭代）

当我们计算 $u_{ik}^{(1)}$ 时只要将 $u_{ik}^{(0)}$ 周围四个点加起来除以 4，将所得的值填表7.3(i,k) 位置上，这样就得到表7.3，再用这个方法由表7.3计算出$u_{ik}^{(2)}$，如此下去算到$u_{ik}^{(n)}$满足所需要的精度为止。

同样我们也可以用采德尔迭代法来解上述方程组，作法可由左到右，由下到上，从图7.2可知 k 小的先作；对固定 k，i 小的先作，于是便有下述迭代公式：

$$u_{ik}^{(n+1)}=\frac{1}{4}(u_{i-1,k}^{(n+1)}+u_{i,k-1}^{(n+1)}+u_{i+1,k}^{(n)}+u_{i,k+1}^{(n)})$$

计算 $u_{ki}^{(1)}$ 时初始值仍为表7.2，先由表7.2中的值计算出$u^{(1)}$并计入表7.4中位置（1.1）上。然后用表7.2中$(i+1,k)$，$(i,k+1)$ 位置$u^{(0)}$值和表7.4中$(i-1,k)$，$(i,k-1)$位置上的$u^{(1)}$值相加除以4，将所得的值填入表7.4中(i,k)的位置上，得出表7.4。如此继续下去就可以计算出$u^{(2)}$，$u^{(3)}$，……直到所需要的精度为止。

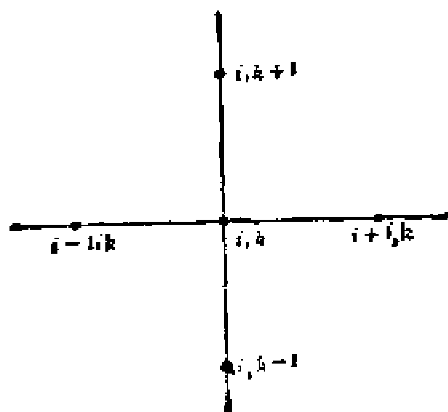


图 7.2

由上面的例子可以看出用差分法解椭圆型方程需要考虑三个问题：

1　选用网格，将微分方程离散化为差分方程。

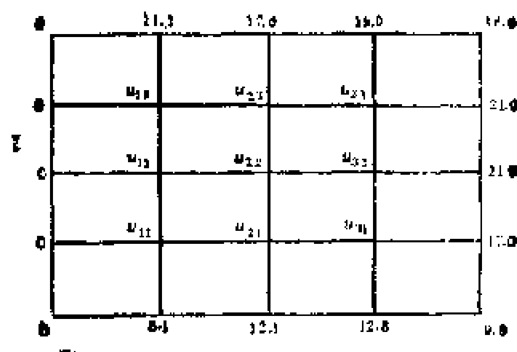
2　当网格步长$h\to 0$时差分方程的准确解是否收敛于微分方程的解？

3　如何解相应的代数方程组？

关于第3个问题，在第三章中已经讨论，这里就不再重复，下面就第1，第2个问题进行讨论。

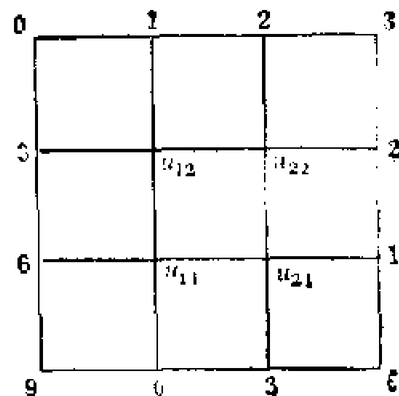
习　　题 7.1

1　解正方形区域上的拉普拉斯方程，边界值如图：



习题　7.1—1

2　按图所给的正方形网域和边界条件，求拉普拉斯方程的解。



习题　7.1—2

§ 2　椭圆型方程的差分解法

椭圆型方程最简单的典型问题就是拉普拉斯方程

$$\Delta u=\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}=0$$

和泊松方程

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x,y)$$

下面以泊松方程第一边值问题为例，来建立差分方程。

考虑泊松方程第一边值问题：

$$\begin{cases} \Delta u = \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x,y), & (x,y)\in\Omega \quad (2,1)_1 \\ u|_{\partial\Omega} = \varphi(x,y), & (x,y)\in\partial\Omega \quad (2,2)_2 \end{cases}$$

（一）矩 形 网 格

设 Ω 为 xy 平面上一有界区域，$\partial\Omega$ 为其边界，是分段光滑曲线。

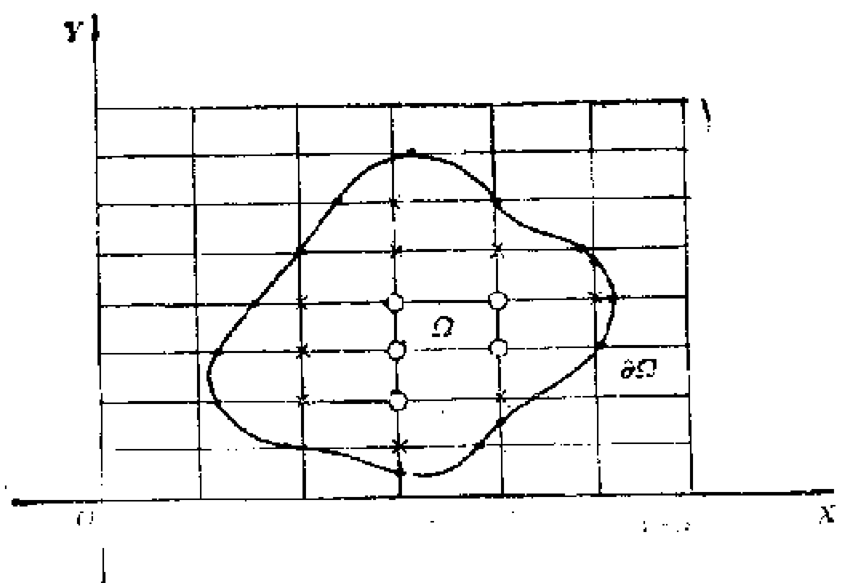


图 7.3

取定沿 x 轴和 y 轴方向的步长分别为 h_1 和 h_2。$h=(h_1^2+h_2^2)^{1/2}$。作与坐标轴平行的两族直线：

$$x = ih_1, \qquad i = 0, \ \pm 1, \ \cdots$$

$$y = kh_2, \qquad k = 0, \ \pm 1, \ \cdots$$

两族直线的交点(ih_1, kh_2)称为网点或节点，记为(x_i, y_k)

或(i,k)。以$\Omega_h=\{(x_i,y_k)\in\Omega\}$表示所有属于$\Omega$内部节点集合，并称此类节点为内点。以$\partial\Omega_h$表示网线$x=x_i$或$y=y_k$与$\partial\Omega$的交点集合，并称此类的点为边界点。令$\overline{\Omega}_h=\Omega_h+\partial\Omega_h$，则$\overline{\Omega}_h$就是代替连续区域$\overline{\Omega}=\Omega+\partial\Omega$的网点集合。若两个节点之间距离等于一个步长称此两个节点为邻点。若内点(x_i,y_i)的相邻点都属于Ω_h，就称为正则内点；否则就称做非正则内点。图7.3中打"○"号的点为正则内点，打"×"号的点为非正则内点，打"•"号的点为界点。

（二）五点差分格式

现在假设(i,k)为正则内点，沿着x,y轴方向分别用二阶中心差商代替u_{xx}，u_{yy}，则得

$$\Delta_h u_{ik}=\frac{u_{i+1,k}-2u_{ik}+u_{i-1,k}}{h_1^2}+\frac{u_{i,k+1}-2u_{ik}+u_{i,k-1}}{h_2^2}=f_{ik}\tag{2.2}$$

称(2.2)为差分方程。式中u_{ik}表示节点(i,k)上的网函数。若以u_h，f_h表示网函数，$u_h(x_i,y_k)=u_{ik}$，$f_h(x_i,y_k)=f_{ik}=f(x_i,y_k)$，则差分方程(2.2)可简写成：

$$\Delta_h u_h=f_h\tag{2.3}$$

利用台劳展式

$$u_{i+1,k}=u_{ik}+h\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{ik}+\frac{h_1^2}{2!}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{ik}+\frac{h_1^3}{3!}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_{ik}+\frac{h_1^4}{4!}\left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right)_{ik}+\frac{h_1^5}{5!}\left(\frac{\partial^5 u}{\partial x^5}\right)_{ik}+\frac{h_1^6}{6!}\left(\frac{\partial^6 u}{\partial x^6}\right)_{(\widetilde{i,k})}$$

$$(i,k)\leqslant(\widetilde{i,k})\leqslant(i+1,k)$$

$$u_{i-1,k}=u_{ik}-h_1\left(\frac{\partial u}{\partial x^2}\right)_{ik}+\frac{h_1^2}{2!}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{ik}-\frac{h_1^3}{3!}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_{ik}$$

$$+\frac{h_1^4}{4!}\left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right)_{ik}-\frac{h_1^5}{5!}\left(\frac{\partial^5 u}{\partial x^5}\right)_{ik}+\frac{h_1^6}{6!}\left(\frac{\partial^6 u}{\partial x^6}\right)_{(\widetilde{i,k'})}$$

$$(i-1,k)\leqslant(\widetilde{i,k'})\leqslant(i,k)$$

$$u_{i,k+1}=u_{ik}+h_2\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{ik}+\frac{h_2^2}{2!}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)_{ik}+\frac{h_2^3}{3!}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial y^3}\right)_{ik}$$

$$+\frac{h_2^4}{4!}\left(\frac{\partial^4 u}{\partial y^4}\right)_{ik}+\frac{h_2^5}{5!}\left(\frac{\partial^5 u}{\partial y^5}\right)_{ik}+\frac{h_2^6}{6!}\left(\frac{\partial^6 u}{\partial y^6}\right)_{(i,\underset{\sim}{k})}$$

$$(i,k)\leqslant(\underset{\sim}{i,k})\leqslant(i,k+1)$$

$$u_{i,k-1}=u_{ik}-h_2\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{ik}+\frac{h_2^2}{2!}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)_{ik}-\frac{h_2^3}{3!}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial y^3}\right)_{ik}$$

$$+\frac{h_2^4}{4!}\left(\frac{\partial^4 u}{\partial y^4}\right)_{ik}-\frac{h_2^5}{5!}\left(\frac{\partial^5 u}{\partial y^5}\right)_{ik}+\frac{h_2^6}{6!}\left(\frac{\partial^6 u}{\partial y^6}\right)_{(i,\underset{\sim}{k'})}$$

$$(i,k-1)\leqslant(\underset{\sim}{i,k'})\leqslant(i,k)$$

这四个式子两两相加便有：

$$\frac{u_{i+1,k}-2u_{ik}+u_{i-1,k}}{h_1^2}=\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{ik}+\frac{h_1^2}{12}\left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right)_{ik}+\frac{h_1^4}{360}\left(\frac{\partial^6 u}{\partial x^6}\right)_{ik}+O(h_1^6)\quad(2.4)$$

$$\frac{u_{i,k+1}-2u_{ik}+u_{i,k-1}}{h_2^2}=\left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)_{ik}+\frac{h_2^2}{12}\left(\frac{\partial^4 u}{\partial y^4}\right)_{ik}+\frac{h_2^4}{360}\left(\frac{\partial^6 u}{\partial y^6}\right)_{ik}+O(h_2^6)\quad(2.5)$$

于是可得差分方程(2.3)的截断误差

$$\begin{aligned}R_{ik}(u)&=\Delta u(x_i,y_k)-\Delta_h u(x_i,y_k)\\&=-\frac{1}{12}\left(h_1^2\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}+h_2^2\frac{\partial^4 u}{\partial y^4}\right)_{i,k}+O(h^4)\\&=O(h^2)\end{aligned}$$

其中 u 是方程（2.1）的光滑解.

由于差分方程（2.2）中只出现 u 在（i，k）及其相邻四个点上的值，故称之为五点差分格式，其图式如图7.2。

特别当取正方形网格：

$$h_1 = h_2 = h$$

则差分方程（2.2）简化为

$$u_{ik} - \frac{1}{4}(u_{i-1,k} + u_{i,k-1} + u_{i+1,k} + u_{i,k+1}) = -\frac{h^2}{4}f_{ik} \tag{2.6}$$

若 $f \equiv 0$，则有

$$u_{ik} = \frac{1}{4}(u_{i-1,k} + u_{i,k-1} + u_{i+1,k} + u_{i,k+1}) \tag{2.7}$$

对每一个正则点，都可以得到一个这样方程，而对非正则点，一般不用上述方法列方程。

（三）边值条件的处理

这里我们只讨论第一边值条件

$$u|_{\partial\Omega} = \varphi(x, y) \tag{2.8}$$

以Ω_h^* 表示非正则内点集合，$\partial\Omega_h$ 表示边界点集合．所谓处理边值条件就是利用（2.8）列出Ω_h^* 中点的补充方程。通常用下述三种方法解决这个问题：

（1）直接转移法

对 $(x_i, y_k) \in \Omega_h^*$，我们用边界上距离这点最近的点 $(\overline{x}_i, \overline{y}_k)$的值作为$(x_i, y_k)$ 的值，即

$$u_{ik} = \varphi(\overline{x}_i, \overline{y}_k) \tag{2.9}$$

（2）线性插值法

图7.4中 1 点属于 Ω_h^*，对此点我们取 2、4 两点沿 x 轴方向作线性插值，1点与4点的距离为 α，则 u 在这些点上的值有近似关系：

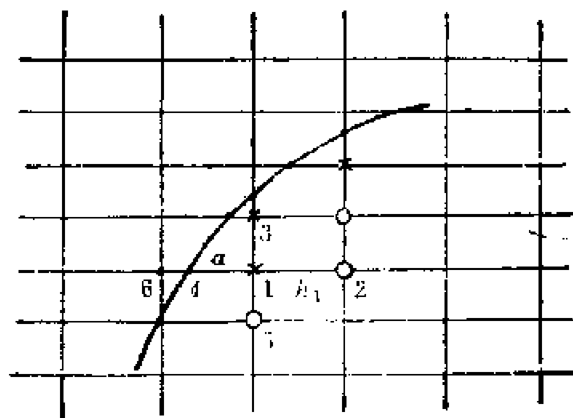


图 7.4

$$\frac{u_2 - u_1}{u_1 - u_4} = \frac{h_1}{\alpha}$$

于是得到：

$$u_1 = \frac{\alpha u_2 + h_1 u_4}{h_1 + \alpha} \tag{2.10}$$

这样在每个边界点上都可列出一个方程，而且不用引进新的未知数，有多少个边界点就列出多少方程，与（2.7）联系起来就得到方程个数与未知数相同的线性代数方程组。

（3）列不等距差分方程

把非正则点看成和正则点一样列不等距差分方程逼近泊松方程。由图7.4所示点 $1 \in \Omega_h^*$，如果点1按正则点列差分方程就要用到区域外点6的 u 值，列方程时不用这个邻点上的 u 值而改用这个方向上网格直线与边界的交点4上的 u 值。仍然用中心差商代替偏导数。于是在节点1的不等距方程为：

$$\frac{1}{\bar{\alpha}}\left(\frac{u_2 - u_1}{h_1} - \frac{u_1 - u_4}{\alpha}\right) + \frac{1}{h_2^2}(u_3 - 2u_1 + u_5) = f_1 \tag{2.11}$$

其中 $\bar{\alpha} = \frac{1}{2}(h_1 + \alpha)$，$f_1$ 为 f 在1点的值。这样就可以得到一个方程个数和未知数个数相同的方程组。

$$u_{ik} = \frac{1}{4}(u_{i+1,k} + u_{i-1,k} + u_{i,k+1} + u_{i,k+1}) - \frac{h^2}{4} f_{ik} \qquad (i,k) \in \Omega_h \tag{2.12}$$

$$u_{ik} = \varphi(\bar{x}_i, \bar{y}_k) \qquad (i,k) \in \partial\Omega_h \tag{2.13}$$

（四）差分方程解的存在唯一性问题

定理1（极值原理）

假设（1）u_{ik} 是定义在网格点上一组值；

（2）$u_{ik} \neq$ 常数；

(3) $\Delta_h u_{ik}=\frac{1}{h^2}(u_{i+1,k}+u_{i-1,k}+u_{i,k+1}+u_{i,k-1}$
$-4u_{ik})\geqslant 0$

则 u_{ik} 不可能在内部节点上达到正的最大值.

类似地，如果第（3）个条件改为 $\Delta_h u_{ik}\leqslant 0$，则 u_{ik} 不可能在内部节点上达到负的最小值.

证明 用反证法.

假定 u_{ik} 在内点取正的最大值. 因为 $u_{ik}\neq$ 常数，故必存在如此的内点 $(i_0,k_0)\in\Omega_h$：在 (i_0,k_0) 上 u_{ik} 取正的最大值，且至少有一个邻点上的值 $u_{ik}<u_{i_0,k_0}$. 因此

$$\Delta_h u_{i_0k_0}=\frac{1}{h^2}(u_{i_0+1,k_0}+u_{i_0-1,k_0}+u_{i_0,k_0+1}+u_{i_0,k_0-1}-4u_{i_0k_0})<0$$

这与假设 $\Delta_h u_{i_0k_0}\geqslant 0$ 相矛盾，所以 u_{ik} 不可能在 Ω_h 内取正的最大值，即

$$\operatorname*{Sup}_{\Omega_h} u_{ik}\leqslant\operatorname*{Sup}_{\partial\Omega_h} u_{ik}$$

定理的第二部分可类似证明.

定理 2 差分方程边值问题 (2.12)，(2.13) 的解存在且唯一.

证明 这只需证明相应的齐次问题

$$\begin{cases}\Delta_h u_{ik}=0 & (i,k)\in\Omega_h\\ u_{ik}=0 & (i,k)\in\partial\Omega_h\end{cases}\tag{2.14}$$

只有零解就可以了.

利用极值原理，易证明 (2.12) 只有零解.

事实上，若 $u_{ik}\equiv$ 常数，则 $c=0$，若 $u_{ik}\neq$ 常数，则由极值原理第一部分可知，u_{ik} 只能在边界上取到正的最大值，但是在 $\partial\Omega_h$ 上 $u_{ik}=0$，因此， $u_{ik}\leqslant 0$，$(i,k)\in\overline{\Omega}_h$.

再应用极值原理第二部分可知，u_{ik} 只能在边界上取到负的最小值，但是在 $\partial\Omega_h$ 上 $u_{ik}=0$，所以必有

$$u_{ik}\geqslant 0,\qquad (i,k)\in\overline{\Omega}_h$$

综合上面两个结果，我们有：

$u_{ik}=0,\quad (i,k)\in\overline{\Omega}_h$ 证完。

（五）差分方程的收敛性与误差估计

定理 3（比较定理）

设（1）V_{ik}, U_{ik}是定义在$\overline{\Omega}_h$上的两个网函数：

（2）$\Delta_h V_{ik}\leqslant -|\Delta_h U_{ik}|,\quad (i,k)\in\Omega_h$ (2.15)

（3）$V_{ik}\geqslant |U_{ik}|,\quad (i,k)\in\partial\Omega_h$ (2.16)

则在网格区域（即$\overline{\Omega}_h$）上，以下不等式成立：

$$|U_{ik}|\leqslant V_{ik} \tag{2.17}$$

证明 因在Ω_h上，$\Delta_h V_{ik}\leqslant -|\Delta_h U_{ik}|$等价于

$$\Delta_h V_{ik}\leqslant \Delta_h U_{ik}\leqslant -\Delta_h V_{ik}$$

于是便有

$$\Delta_h(V_{ik}-U_{ik})\leqslant 0,\quad \Delta_h(V_{ik}+U_{ik})\leqslant 0 \tag{2.18}$$

因为在$\partial\Omega_h$上有

$$-V_{ik}\leqslant U_{ik}\leqslant V_{ik} \tag{2.19}$$

即

$$V_{ik}-U_{ik}\geqslant 0,\quad V_{ik}+U_{ik}\geqslant 0$$

由极值定理可知，在网格区域上处处有

$$V_{ik}-U_{ik}\geqslant 0,\quad V_{ik}+U_{ik}\geqslant 0$$

即不等式

$|U_{ik}|\leqslant V_{ik}$ 证完。

现在考虑对于任意一个内部节点

$$(\overline{x},\ \overline{y})=(x_i, y_k)$$

当$h\longrightarrow 0$时是否有$u_{ik}\longrightarrow u(\overline{x},\ \overline{y})$?

由于微分方程的解$u(x,y)$在Ω_h内满足方程

$$\Delta_h u(x_i, y_k)=(\Delta u)_{ik}+R_{ik}(u) \tag{2.20}$$

而

$$R_{ik}(u)=-\frac{h^2}{12}\left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}+\frac{\partial^4 u}{\partial y^4}\right)_{ik}+O(h^4)$$

设

$$M_4=\max\left\{\left|\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right|,\ \left|\frac{\partial^4 u}{\partial y^4}\right|\right\}$$

则

$$|R_{ik}(u)|\leqslant\frac{1}{6}M_4h^2 \tag{2.21}$$

现在令

$$W_{ik}=u(x_i,y_k)-u_{ik}$$

则有 $\Delta_h W_{ik}=R_{ik}(u),\quad (i,k)\in\Omega_h$

为讨论简便，考虑边界无误差的情形，即

$$W_{ik}=0,\ (i,k)\in\partial\Omega_h \tag{2.22}$$

根据对$R_{ik}(u)$的估计式（2.21），我们有

$$|\Delta_h W_{ik}|=|R_{ik}(u)|\leqslant\frac{1}{6}M_4h^2 \tag{2.23}$$

为了能利用比较定理证明收敛性，我们构造函数$Q=Q(x,y)$使之满足差分方程：

$$\Delta_h Q_{ik}=-\frac{1}{6}M_4h^2,\ (i,k)\in\Omega_h$$

$$0=|W_{ik}|\leqslant Q_{ik}\qquad (i,k)\in\partial\Omega_h \tag{2.24}$$

于是有

$$\Delta_h Q_{ik}=-\frac{1}{6}M_4h^2\leqslant-|R_{ik}(u)|=-|\Delta_h W_{ik}|$$

又（2.24）式第二式

$$0=|W_{ik}|\leqslant Q_{ik}$$

由比较定理可知：

$$|W_{ik}|\leqslant Q_{ik},\ (i,k)\in\overline{\Omega}_h$$

因此只要对Q_{ik}作出估计，就可以得到误差为$|W_{ik}|$的估计。因为

$$\Delta_h Q_{ik}=-\frac{1}{6}M_4h^2$$

所以希望构造的函数$Q=Q(x,y)$是一个二次曲面，$Q(x,y)\geqslant$

0，并且覆盖$W=W(x,y)$。

作辅助函数

$$Q(x,y)=r^2-(x-x_0)^2-(y-y_0)^2 \tag{2.25}$$

它与xy平面交于一个圆

$$(x-x_0)^2+(y-y_0)^2=r^2$$

以r为半径，(x_0, y_0)为圆心。我们知道对于任意具有四阶连续导数的函数$F(x,y)$，都有

$$\Delta_h F(x_i, y_k)=(\Delta F)_{ik}+R_{ik}(u)$$

因为（2.25）所给出的函数是二次的，所以它的四阶偏导数为零，即$R_{ik}(u)=0$，于是

$$\Delta_h Q(x_i, y_k)=-4 \tag{2.26}$$

因此，函数$\frac{1}{24}h^2M_4Q(x,y)$一定满足不等式

$$\Delta_h(\frac{1}{24}h^2M_4Q(x,y))=-\frac{1}{6}Mh^2\leqslant-|R_{ik}(u)|$$

（因由（2.21），（2.22）式而上面不等式成立）。

而

$$Q(x_i, y_k)=W_{ik}=0,\quad (i,k)\in\partial\Omega_h$$

故有

$$|W_{ik}|\leqslant\frac{1}{24}M_4h^2Q_{ik}\leqslant\frac{1}{24}M_4h^2r^2 \tag{2.27}$$

上面的讨论可归纳为如下的定理：

定理4 若$(2.1)_1$，$(2.1)_2$的解$u(x,y)\in C^4(\overline{\Omega})$则五点差分格式收敛，且有估计式（2.27）。

以上定理证明了对任意一个固定节点$(x_i, y_k)=(\overline{x}, \overline{y})$，当$h\to 0$时$u_{ik}\to u(\overline{x}, \overline{y})$且有误差估计

$$|u(\overline{x}, \overline{y})-u_{ik}|\leqslant\frac{1}{24}h^2r^2M_4$$

但$u(\overline{x}, \overline{y})$一般是不知道的，这个估计只是告诉我们：差分方

程当$h\to 0$时，($u_{ik}\to u(\bar{x},\bar{y})$) 是收敛的，这样估计为事前估计。

为了要在实际计算中估计误差，我们要采用事后估计的办法，现叙述如下：设

$$\varepsilon_{ik}^{(h/2)}=u_{ik}^{(h)}-u(\bar{x},\ \bar{y})\approx ch^n$$

式中$\varepsilon_{ik}^{(h)}$表示步长为h在节点(i,k)上u的近似值$u_{ik}^{(h)}$与准确值之差，而c是与h，n无关的常数。再用$h/2$作为步长算得$u_{ik}^{h/2}$，如此有

$$\varepsilon_{ik}^{(h/2)}=u_{ik}^{(h/2)}-u(\bar{x},\bar{y})\approx c(h/2)^n$$

所以

$$u_{ik}^{(h)}-u_{ik}^{(h/2)}\approx C(1-2^{-n})h^n$$

即

$$\frac{u_{ik}^{(h)}-u_{ik}^{h/2)}}{1-2^{-n}}\approx ch^n=\varepsilon_{ik}^{(h)} \tag{2.28}$$

这就是在实际计算过程中估计误差的公式，其中$u_{ik}^{(h)}$和$u_{ik}^{(h/2)}$分别表示用h和$h/2$作为步长所算得的差分方程的解，那么

$$\frac{u_{ik}^{(h)}-u_{ik}^{(h/2)}}{1-2^{-n}}$$

就是误差$\varepsilon_{ik}^{(h)}$的近似值。

习　　题 7.2

1　若椭圆型方程为

$$Lu=a\frac{\partial^2u}{\partial x^2}+b\frac{\partial^2u}{\partial y^2}+c\frac{\partial u}{\partial x}+d\frac{\partial u}{\partial y}+gu=f(x,y),$$
$$(x,y)\in\Omega$$

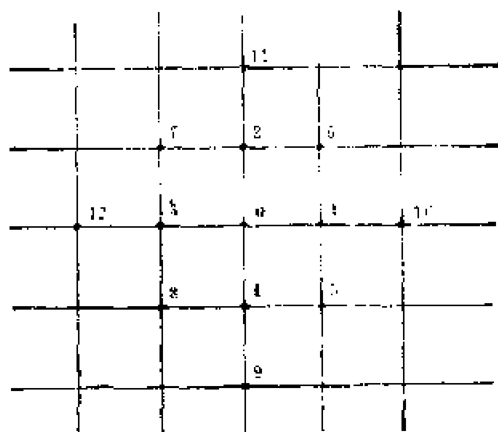
试构造其差分格式，并估计其截断误差。

其中a，b，c，d，g，f均为x，y的已知函数，Ω为xy平面上的有界区域，并假定函数$a(x,y)$，$b(x,y)$，$c(x,y)$，$d(x,y)$，$g(x,y)$，$f(x,y)$在Ω上连续，并且$a\geqslant a_0>0$，$b\geqslant b_0>0$，$g\leqslant 0$。

2　对于双调和方程

$$\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}+2\frac{\partial^4 u}{\partial x^2\partial y^2}+\frac{\partial^4 u}{\partial y^4}=f(x,y)$$

用下述十三点上$u(x,y)$的值近似地表示u的四阶导数，并且构造相应差分格式，其截断误差是什么？



习题　7.2—2

3　利用差分法求解

$$\begin{cases}\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2}=0, \quad 0<x<4, \quad 0<y<3\\ u|_{x=0}=y(3-y), \quad u_{x=4}=0\\ u|_{y=0}=\sin\dfrac{\pi}{4}x, \quad u|_{y=3}=0\end{cases}$$

取步长为1，精确到10^{-4}。

§3　抛物型方程的差分解法

象前一节一样，我们仍旧从最简单抛物型方程入手，研究这类方程的数值解法——差分法。

抛物型方程最简单的是一维热导方程：

$$Lu=\frac{\partial u}{\partial t}-a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}=0, a>0, 0<t\leqslant T \qquad (3.1)$$

它的定解条件主要有以下两类：

（i）初值问题（或称柯西(Cauchy)问题）．

$$u|_{t=0}=\varphi(x),\quad -\infty<x<+\infty \tag{3.2}$$

（ii）边值问题（或称混合问题）．

$$\begin{cases}u|_{t=0}=\varphi(x) & 0<x<1\\ u(0,t)=u(1,t)=0\end{cases} \tag{3.3}$$

求（3.1）满足（i）或（ii）的解．

这里我们首先以（3.1），（3.2）为模型进行讨论．研究如何构造差分方程及其有关理论问题．在这个讨论中，总是假定 $\varphi(x)$ 是充分光滑的，以保证所讨论的问题存在着充分光滑的解，并且这个解是唯一的．

（一）矩 形 网 格

用两组平行直线族 $x_j=jh$，$t_k=k\tau(j=0,\ \pm1,\cdots,\ k=0,\ \pm1,\cdots)$构成的矩形网覆盖了整个$xt$平面，网格点$(x_j,t_k)$称为节点，简记为$(j,k)$，$h$，$\tau$ 为正常数，分别称为空间步长及时间步长(或h称沿x方向的步长，τ称为沿t方向的步长）．在 $t=0$上的节点称为边界节点，其余所有属于$\{-\infty<x<+\infty,\ 0<t\leqslant T\}$内的节点称为内部节点．

（二）古典差分格式

在我们讨论的方程中，有一阶微商，对一阶微商来说，常用的有向前差商．u在点（i，k）关于t的向前差商表达式为：

$$\left[\frac{\partial u}{\partial t}\right]_j^k=\frac{u(x_j,t_{k+1})-u(x_j,t_k)}{\tau}-\frac{\tau}{2}u_{tt}(x_j,\ \tilde{t}_k) \tag{3.4}$$

式中$[\quad]_j^k$表示括号内函数u在节点（j，k）处的值．$|\tilde{t}_k-t_k|\leqslant\tau$．另外还有向后差商和中心差商，它们的表示式分别为：

$$\left[\frac{\partial u}{\partial t}\right]_j^k=\frac{u(x_j,\ t_k)-u(x_j,\ t_{k-1})}{\tau}+\frac{\tau}{2}u_{tt}(x_j,\ \widetilde{\widetilde{t_k}})$$

(3.5)

式中 $|\widetilde{\widetilde{t_k}}-t_k|\leqslant\tau$,

$$\left[\frac{\partial u}{\partial t}\right]_j^k=\frac{u(x_j,\ t_{k+1})-u(x_j,\ t_{k-1})}{2\tau}-\frac{\tau^2}{6}u_{t^3}^{(3)}(x_j,\widetilde{\widetilde{\widetilde{t_k}}})$$

(3.6)

式中 $|\widetilde{\widetilde{\widetilde{t_k}}}-t_k|\leqslant\tau$。

建立（3.1）的差分格式，除要用到上面一阶差商的各种表达式外，还要用到二阶差商，u在点$(j,\ k)$关于自变量x的二阶差商可表为：

$$\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right]_j^k=\frac{u(x_{j+1},t_k)-2u(x_j,t_k)+u(x_{j-1},t_k)}{h^2}-$$

$$-\frac{h^2}{12}u_{x^4}^{(4)}(\widetilde{x_j},t_k) \tag{3.7}$$

式中$|\widetilde{x}_j-x_j|\leqslant h$。

对方程（3.1）选用各种不同的差商近似，就可得到各种不同的差分格式，对（3.1）用（3.4）和（3.6）代入，则可得到

$$\frac{u(x_j,t_{k+1})-u(x_j,t_k)}{\tau}-$$

$$-a\frac{u(x_{j+1},t_k)-2u(x_j,t_k)+u(x_{j-1},t_k)}{h^2}$$

$$=[Lu]_j^k+\frac{\tau}{2}u_{tt}(x_j,\ \widetilde{t_k})-\frac{h^2}{12}u_{x^4}^{(4)}(\widetilde{x_j},t_k)$$

$$=[Lu]_j^k+O(\tau+h^2) \tag{3.8}$$

当u满足方程（3.1），即$Lu=0$时，若略去误差项：

$$R_{h\tau}=\frac{\tau}{2}u_{tt}(x_j,\ \widetilde{t_k})-\frac{h^2}{12}u_{x^4}^{(4)}(\widetilde{x_j},t_k)=O(\tau+h^2)$$

由（3.8）看出方程式（3.1）在 (j,k) 点可以用下列方程近似代替：

$$L_{h\tau}u_j^k=\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}-a\frac{u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k}{h^2}=0 \quad (3.9)$$

$$j=0,\ \pm1\cdots;k=0,1\cdots$$

式中 u_j^k 视为 $u(x_j,t_k)$ 的近似值。

为了便于计算可将（3.9）改写成：

$$u_j^{k+1}=(1-2r)u_j^k+r(u_{j+1}^k+u_{j-1}^k) \quad (3.10)$$

式中 $r=a\tau/h^2$ 称为网比，(3.10)是一组线性代数方程组，由此方程组可知，在点 (j,k) 列方程时，用到 $(j+1,k)$，$(j-1,k)$，$(j,k+1)$ 三个点。这个差分格式可用右图表示。

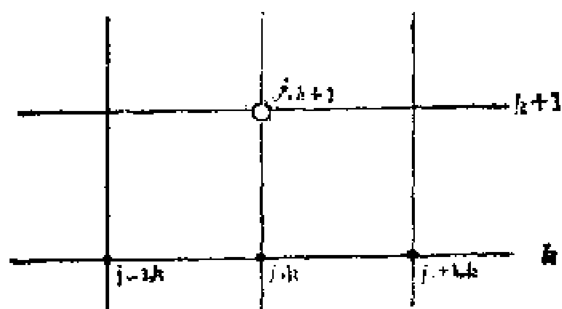


图 7.5

从图可以看出，如果在第 k 层的值 u_j^k 已算得，就可以利用（3.10）式求得第 $k+1$ 层的值。利用初始条件(3.2)这一层值 $u_j^0=\varphi_j\equiv\varphi(x_j)$，就可依次算出 $k=1,2\cdots$ 各层上的值 u_j^k。这种差分格式称为**古典显式差分格式**。

若 $u(x,t)$ 为方程（3.1）的解，则从（3.8）式可以得到：

$$L_{h\tau}[u]_j^k-[Lu]_j^k=O(\tau+h^2) \quad (3.11)$$

即差分方程（3.9）的截断误差的阶为 $O(\tau+h^2)$。

如果将（3.5）和（3.7）代入（3.1）则可得到

$$\begin{aligned}&\frac{u(x_j,t_k)-u(x_j,t_{k-1})}{\tau}\\&-a\frac{u(x_{j+1},t_k)-2u(x_j,t_k)+u(x_{j-1},t_k)}{h^2}\\&=[Lu]_j^k-\frac{\tau}{2}u_{tt}(x_j,\tilde{\tilde{t}}_k)-\frac{h^2}{12}u_{x^4}^{(4)}(\tilde{x}_j,t_k)\\&=[Lu]_j^k+O(\tau+h^2)\end{aligned}$$

当 u 满足方程（3.1），即 $Lu=0$时，若略去误差项：

$$R_{h\tau}=-\frac{\tau}{2}u_{tt}(x_j,\widetilde{\widetilde{t_k}})-\frac{h^2}{12}u_{x^4}^{(4)}(\widetilde{x_j},t_k)$$

由（3.11）看出方程（3.1）在点(j,k)可以用下列方程近似代替：

$$L_{h\tau}u_j^k=\frac{u_j^k-u_j^{k-1}}{\tau}-a\frac{u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k}{h^2}=0 \quad (3.12)$$

其中 $j=0,\pm1,\pm2,\cdots$；$k=0,1,2,\cdots$。

为了便于计算可将（3.12）改写为以下形式

$$(1+2r)u_j^k-ru_{j-1}^k-ru_{j+1}^k=u_j^{k-1} \quad (3.13)$$

利用初始条件（3.2），差分方程（3.12）可以逐层地求解，但每一个差分方程中有 k 层上三个节点的值出现，所以为了求出第 k 层上所有的u_j^k的值，就必须求解下述联立方程组：

$$\begin{cases}(1+2r)u_j^k-ru_{j-1}^k-ru_{j+1}^k=u_j^{k-1}\\ \qquad\qquad j=0,\pm1,\cdots;k=0,1,\cdots\\ u_j^0=\varphi_j=\varphi(x_j)\end{cases} \quad (3.14)$$

这种差分格式称为古典隐式差分格式。

此外，在点(j,k)建立这种差分格式时，用到$(j-1,k)$，$(j+1,k)$，$(j,k-1)$三个点，这一格式可用右图表示。

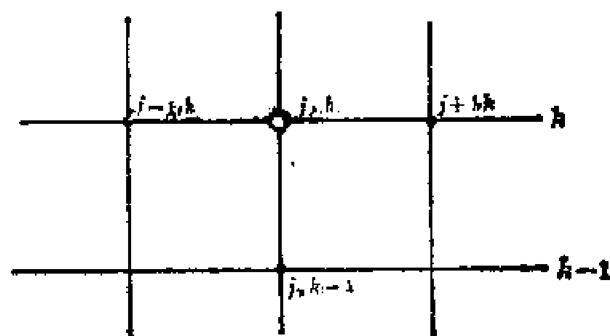


图 7.6

截断误差阶为 $O(\tau+h^2)$，与古典显格式相同。这个误差的大小，将直接影响差分方程解的误差 $u_j^k-u(x_j,t_k)$。

为了提高截断误差的阶，可将(3.6)，(3.7)代入（3.1），仿前面古典差分格式的讨论，则有

$$\frac{u(j,k+1)-u(j,k-1)}{2\tau}$$

$$-a\frac{u(j+1,k)-2u(j,k)+u(j-1,k)}{h^2}$$

$$=[Lu]_j^k-\frac{\tau^2}{6}u_{t^3}^{(3)}(x_j,\overline{\overline{\overline{t_k}}})+\frac{h^2}{12}u_{x^4}^{(4)}(\widetilde{x_j},t_k)$$

$$=[Lu]_j^k+R_{h\tau}. \tag{3.15}$$

其中

$$R_{h\tau}=-\frac{\tau^2}{6}u_{t^3}^{(3)}(x_j,\overline{\overline{\overline{t_k}}})+\frac{h^2}{12}u_{x^4}^{(4)}(\widetilde{x_j},t_k)$$

$$=O(\tau^2+h^2) \tag{3.16}$$

当 u 满足方程（3.1）时，而略去误差项 $R_{h\tau}$．由（3.15）可以看出方程（3.1）在点(j,k)可用下列方程近似代替：

$$L_{h\tau}u_j^k=\frac{u_j^{k+1}-u_j^{k-1}}{2\tau}-a\frac{u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k}{h^2}=0$$

上述差分格式还可以改写为

$$u_j^{k+1}=u_j^{k-1}+2r(u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k) \tag{3.17}$$

由差分格式（3.17）可知，方程（3.1）在点(j,k)列差分方程时，要用到$(j-1,k)$，$(j+1,k)$，$(j,k-1)(j,k+1)$四个点，用图式可以表示为：

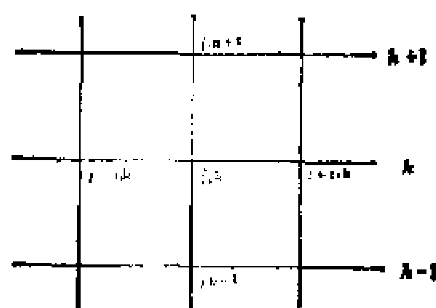


图 7.7

这种差分格式叫做李查逊（Richardson）格式。是一种显格式，但和前面所讲的两种格式是不同的．不管是古典显格式，还是古典隐格式，由第 k 层的值u_j^k，通过解方程就可以求得第$k+1$层的u_j^{k+1}值，这两种格式都称为二层格式．而李查逊格式，为了计算第$k+1$层的u_j^{k+1}值，需要算出第 k 层和第$k-1$层的值．这种格式称为三层格式．由（3.16）可知当$h\to0$，$\tau\to0$时差分方程（3.17）逼

近微分方程（3.1），其截断误差阶为$O(\tau^2+h^2)$较古典显格式和古典隐格式都提高了截断误差阶。

上面我们已经构造出三种差分格式，还可以构造出一些其它格式，这些格式从形式上看都是可以进行计算的。但还有两个问题尚须研究，那就是：

1° 差分方程的解是否逼近微分方程的解（即收敛问题）；

2° 差分方程在计算过程所产生的误差是不断增大，还是可以控制(即稳定问题)。可以证明二者在适当的条件下，从稳定性可以推出收敛性，因此，这里我们只是讨论稳定性问题。

（三）差分格式的稳定性

因为初值问题的差分格式是逐层计算的，在逐层计算的过程中，误差当然也会逐层传播，这种误差的积累若是越来越大，以至到一定时候淹没真解，这就是所谓数值不稳定性。对一个不稳定的差分格式，尽管它有许多其它方面的优点，也是不实用的。为了说明稳定性的概念，我们以差分格式（3.10）和（3.17）为例，用ε图来给出一个感性认识：

在格式（3.10）中，取$r=\dfrac{1}{2}$，此时格式化简为：

$$u_j^{k+1}=\frac{1}{2}(u_{j+1}^k+u_{j-1}^k) \tag{3.18}$$

假定在初始层点$(j_0,0)$上产生误差ε，而在初始层其它各点没有误差，并且假定在以后各层上的计算都没有引入其它误差，我们来考虑误差是怎样传播的：

假定差分方程精确解满足

$$u_j^{k+1}=\frac{1}{2}(u_{j+1}^k+u_{j-1}^k) \tag{3.19}$$

而差分方程近似解（由于ε的产生）$\tilde{u}_j^k$则应满足

$$\widetilde{u}_j^{k+1} = \frac{1}{2}(\widetilde{u}_{j+1}^k + \widetilde{u}_{j-1}^k) \tag{3.20}$$

因此误差$\varepsilon_j^k = \widetilde{u}_j^k - u_j^k$应满足误差方程

$$\varepsilon_j^{k+1} = \frac{1}{2}(\varepsilon_{j+1}^k + \varepsilon_{j-1}^k) \tag{3.21}$$

按着这一误差方程可得误差ε传播趋势如下表：

表7.5　$r = \frac{1}{2}$时古典显格式的误差传播

	j_0-4	j_0-3	j_0-2	j_0-1	j_0
$k=5$	0	0.15625 ε	0	0.3125 ε	0
$k=4$	0.0625 ε	0	0.25 ε	0	0.375 ε
$k=3$		0.125 ε	0	0.375 ε	0
$k=2$			0.25ε	0	0.5 ε
$k=1$				0.5 ε	0
$k=0$					ε

	j_0+1	j_0+2	j_0+3	j_0+4	
$k=5$	0.3125 ε	0	0.15625 ε	0	
$k=4$	0	0.25 ε	0	0.0625 ε	
$k=3$	0.375 ε	0	0.125 ε		
$k=2$	0	0.25ε			
$k=1$	0.5 ε				
$k=0$					

从表中看出，此时误差将逐渐衰弱，显然这样的误差变化情况是允许的。其它条件不变，如果我们选用$r=1$时，则误差方程为：

$$\varepsilon_j^{k+1} = \varepsilon_{j+1}^k + \varepsilon_{j-1}^k - \varepsilon_j^k \tag{3.22}$$

ε传播如表7.6。

从表7.6中看出，此时误差在不断增加，因此这种差分格

式是不能使用的.

表7.6　$r=1$时古典显格式误差传播

	j_0-5	j_0-4	j_0-3	j_0-2	j_0-1	j_0	j_0+1	j_0+2	j_0+3	j_0+4	j_0+5
$k=5$	ε	-5ε	15ε	-30ε	45ε	-51ε	45ε	-30ε	15ε	-5ε	ε
$k=4$		ε	-4ε	10ε	-16ε	19ε	-16ε	10ε	-4ε	ε	
$k=3$			ε	-3ε	6ε	-7ε	6ε	-3ε	ε		
$k=2$				ε	-2ε	3ε	-2ε	ε			
$k=1$					ε	$-\varepsilon$	ε				
$k=0$						ε					

现在，再来考查李查逊格式的稳定性。同样用ε_j^k表示计算u_j^k所产生的误差，并且我们取 $r=\frac{1}{2}$，与此相应的误差方程可以写成下列形式

$$\varepsilon_j^{k+1}=\varepsilon_{j+1}^k-2\varepsilon_j^k+\varepsilon_{j-1}^k+\varepsilon_j^{k-1} \tag{3.23}$$

我们假设 $k-1$层之前没有误差存在，即 $\varepsilon_j^{k-1}=0$，而在第k层点$(j,\ k)$处产生了误差ε，并且这一层其它点也无误差，而且在计算过程中，不再产生新的误差，利用（3.23）算出误差ε传播如下表：

表7.7　$r=\frac{1}{2}$时李查逊格式的误差传播

k/j_0	j_0-4	j_0-3	j_0-2	j_0-1	j_0
$k+6$	71ε	-260ε	641ε	-1096ε	1311ε
$k+5$	-10ε	49ε	-144ε	273ε	-388ε
$k+4$	ε	-8ε	31ε	-68ε	89ε
$k+3$		ε	-6ε	17ε	-24ε
$k+2$			ε	-4ε	7ε
$k+1$				ε	-2ε
k					ε

k/j_0	j_0+1	j_0+2	j_0+3	j_0+4
$k=6$	-1096ε	641ε	-260ε	71ε
$k=5$	273ε	-144ε	49ε	-10ε
$k=4$	-68ε	31ε	-8ε	ε
$k=3$	17ε	-6ε	ε	
$k=2$	-4ε	ε		
$k=1$	ε			
k				

从上面三张 ε 的分布图可以看出：古典显格式，当 $r=1$ 时，ε 的传播是逐层增大，因此是不稳定的；而李查逊格式，当 $r=\frac{1}{2}$ 时，ε 的传播也是逐层增大，因此也是不稳定的。

经过分析看出，稳定性问题不仅与差分格式有关，而且还与网格的步长之比有关。如果适当地选取时间步长和空间步长，才能使格式稳定。这种格式的稳定是有条件的，此种稳定称为条件稳定；若格式对任何步长之比都稳定，此种稳定称为无条件稳定；　若格式对任何步长之比都不稳定，就称为完全不稳定。对稳定性的定义是有各种形式的，但是其本质是研究差分问题的解，在一定范数意义下，网比为常数网格步长趋于零时，差分格式的解连续依赖于给定初值问题。

下面我们给出一个讨论稳定性的常用富里埃（Fourier）方法，简称富氏方法，我们首先以（3.10）为例，说明富氏方法分析稳定的过程和方法，与（3.10）相应的误差方程为：

$$\varepsilon_j^{k+1}=\varepsilon_j^k+r(\varepsilon_{j+1}^k-2\varepsilon_j^k+\varepsilon_{j-1}^k) \tag{3.24}$$

我们把初始误差ε_j^0表示成一个简谐波的形式：

$$\varepsilon_j^0=e^{inx_j} \tag{3.25}$$

式中 $i=\sqrt{-1}$，n是频率参数，试定形如

$$\varepsilon_j^k=G^k e^{inx_j}=G^k e^{injh} \tag{3.26}$$

的解，这实际上是假定ε_j^k的振幅为G^k，频率为 n 的谐波。

将（3.26）代入（3.24）得

$$G^{k+1}e^{injh}=G^k e^{injh}+r(G^k e^{in(j+1)h}-2G^k e^{injh}+G^k e^{in(j-1)h})$$

两边消去共同因子$G^k e^{injh}$ 得

$$G=1+r(e^{inh}-2+e^{-inh}) \tag{3.27}$$

这是因为 $x_j=jh$，$x_{j+1}=(j+1)h=jh+h$，$x_{j-1}=jh-h$。（3.27）是差分方程（3.10）的特征方程，从（3.27）容易推出

$$
\begin{aligned}
G &= 1 + r(\cos nh + i\sin nh - 2 + \cos nh - i\sin nh) \\
&= 1 + r(2\cos nh - 2) \\
&= 1 - 2r(1 - \cos nh) \\
&= 1 - 4r\sin^2 \frac{nh}{2}
\end{aligned}
\tag{3.28}
$$

这里G叫做增长因子（或叫做 传 播 因 子），因为从（3.26）可以看到，当$|G|>1$时，误差随着k作指数增长，当$|G|<1$时，则误差不增长。由于初始误差可以表为不同频率的谐波的迭加，并且由于计算中舍入误差的随机性，应该认为所有n的频率组成部分都是可能出现的，因此数值稳定条件是：

$$|G| \leqslant 1，对一切 n \tag{3.29}$$

从（3.28）要

$$|G| = |1 - r\sin^2\frac{nh}{2}| < 1$$

对一切n都成立，必要充分条件是

$$r \leqslant \frac{1}{2} 或 \tau = \frac{h^2}{2a} \tag{3.30}$$

这说明（3.10）是条件稳定的，当时间步长τ和空间步长h满足不等式（3.30）时为稳定，否则不稳定。

从上面的讨论过程可以看出，用富氏方法讨论稳定性有这样几个主要步骤：首先假定误差是具有谐波形式的，然后代入差分方程的相应误差方程，得到相应的特征方程，第三是求出特征方程的增长因子，最后判定增长因子是否小于等于1，增长因子小于等于1是稳定的，否则是不稳定的，使增长因子小于等于1的条件，就是稳定条件。

隐格式（3.13）的特征方程是

$$G = 1 + r(Ge^{inh} - 2G + Ge^{-inh})$$

这时增长因子为

$$G = 1/\left(1 + 4r\sin^2\frac{nh}{2}\right) \tag{3.31}$$

无论 τ，h 如何选取，恒有 $|G|<1$。因此格式（3.13）是无条件稳定的，或者称绝对稳定。

李查逊格式（3.17）的特征方程是

$$
\begin{aligned}
G^2 &= 1+2r(Ge^{inh}-2G+Ge^{-inh}) \\
&= 1+2r[G(\cos nh+i\sin nh)-2G \\
&\quad +G(\cos nh-i\sin nh)] \\
&= 1+2r(2G\cos nh-2G) \\
&= 1-2rG(1-\cos nh) \\
&= 1-4rG\sin^2\frac{nh}{2}
\end{aligned}
$$

G 有两个根：

$$
G_{1,2}=-4r\sin^2\frac{nh}{2}\pm\sqrt{1+(4r\sin^2\frac{nh}{2})^2} \tag{3.32}
$$

不论 τ，h 怎样选取。总有 n 能使 $|G|>1$，因此李查逊格式是恒不稳定的，尽管这个格式提高了截断误差阶，但却不能使用。

习 题 7.3

1 若抛物型方程为

$$
\begin{cases}
Lu=\dfrac{\partial u}{\partial t}-a(x,t)\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}-2b(x,t)\dfrac{\partial u}{\partial x} \\
\qquad +c(x,t)u=d(x,t) & (1) \\
\qquad\qquad 0<x<L,\ 0<t<T \\
u|_{t=0}=\varphi(x),0<x<L & (2) \\
u|_{x=0}=\mu_1(t),u|_{x=l}=\mu_2(t),0\leqslant t<T & (3)
\end{cases}
$$

其中 $a(x,t)>0$。试构造其差分格式。

2 试利用显式差分格式，求定解问题

$$
\begin{cases}
\dfrac{\partial u}{\partial t}-\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}=0,0<x<1,\ t>0 \\
u(x,0)=4x(1-x),\quad 0\leqslant x\leqslant 1 \\
u(0,t)=(1,t)=0,\quad t\geqslant 0
\end{cases}
$$

取 $r=\frac{1}{6}$，$h=0.2$，计算出$k=1$，2两层数值解。

§ 4　双曲型方程的差分解法

一阶线性双曲型方程最简单的形式为

$$Lu=\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}=0 \tag{4.1}$$

当给定初始条件

$$u(x,0)=\varphi(x),\quad -\infty<x<+\infty \tag{4.2}$$

以后，容易验证，双曲型方程（4.1）的解为

$$u(x,t)=\varphi(x-at)\ t>0,\quad -\infty<x<+\infty \tag{4.3}$$

也就是说，在平面xt上，沿着

$$x-at=k\quad (k\text{ 是常数})$$

这样的直线，u的值保持不变。这种直线叫做特征线。

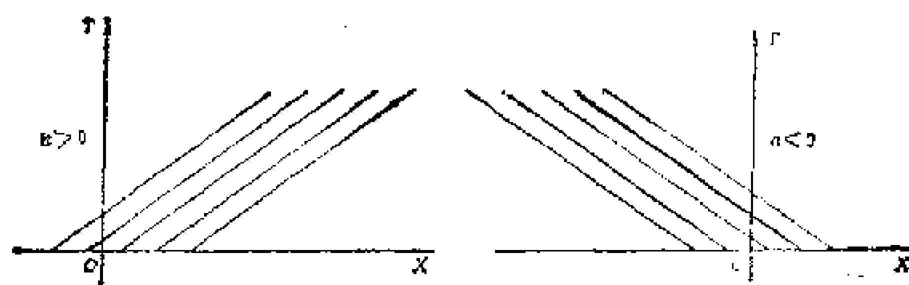


图　7.8

如果把（4.2）看作在初始时刻$t=0$的波形，则（4.3）表示这个波形以速度$|a|$传播，当$a>0$时沿x方向传播，当$a<0$时沿$-x$方向传播，而波形保持不变。

在物理上常见的双曲型偏微分方程最简单模型是波动方程

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}-a^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}=0 \tag{4.4}$$

其中$a>0$，如果引进变量

$$U = \frac{\partial u}{\partial t}, \quad W = a\frac{\partial u}{\partial x} \tag{4.5}$$

则得与波动方程等价的方程组

$$\begin{cases} \dfrac{\partial U}{\partial t} = a\dfrac{\partial W}{\partial x} \\ \dfrac{\partial W}{\partial t} = a\dfrac{\partial U}{\partial x} \end{cases} \tag{4.6}$$

此方程组显然为双曲型的，称做线性双曲型方程组。它的特征方向是：

$$\frac{dt}{dx} = \pm\frac{1}{a} \tag{4.7}$$

解常微分方程（4.7），便得二族特征线：

$$\begin{cases} x - at = c_1 \\ x + at = c_2 \end{cases} \tag{4.8}$$

在此，我们仅讨论一阶双典型偏微分方程初值问题的差分法，对波动方程（4.4）我们将放在习题里进行讨论。

（一）矩 形 网 格

象前两节所讨论的问题一样，我们先将xt平面用两组平行于坐标轴的等距直线族：

$$\begin{aligned} &x = x_j = jh, \quad j = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \\ &t = t_k = t_0 + k\tau, \tau = 0, 1, 2, \cdots \end{aligned} \tag{4.9}$$

分割成矩形网格。在x方向步长为h，在t方向步长为τ。一般说来并不要求h与τ相等，在以前的讨论中我们已经看到，格式的稳定性和它们的选取有关。

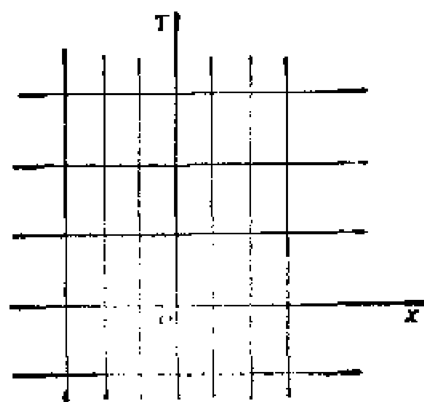


图 7.9

为了叙述方便，用(j, k)来表示网格点(x_j, t_k)，用

$u(j,k)$表示$u(x_j, t_k)$的值。

（二）一阶线性偏微分方程的差分法

考虑初值问题

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} + a\dfrac{\partial u}{\partial x} = 0 & (4.1) \\ u(x,0) = \varphi(x), \quad -\infty < x < +\infty & (4.2) \end{cases}$$

其中 a 为常数。

在我们讨论的方程中，对 x 和 t 都是一阶微商。首先我们利用台劳级数写出 u 在 (j, k)点，关于自变量 x 的向前，向后和中心差商的各种表达式分别为：

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_j^k = \frac{u(x_{j+1}, t_k) - u(x_j, t_k)}{h} - \frac{h}{2}u''_{x^2}(\widetilde{x_j}, t_k) \qquad (4.10)$$

式中$|\widetilde{x_j} - x_j| \leqslant h$。

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_j^k = \frac{u(x_j, t_k) - u(x_{j-1}, t_k)}{h} + \frac{h}{2}u''_{x^2}(\overset{\approx}{x_j}, t_k) \qquad (4.11)$$

式中$|\overset{\approx}{x_j} - x_j| \leqslant h$。

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_j^k = \frac{u(x_{j+1}, t_k) - u(x_{j-1}, t_k)}{2h} - \frac{h^2}{6}u^{(3)}_{x^3}(\overset{\equiv}{x_j}, t_k) \qquad (4.12)$$

式中$|\overset{\equiv}{x_j} - x_j| \leqslant h$。

对方程（4.1）选用各种不同的差商近似，就可以得到各种不同的差分格式。

1 显格式

对 (4.1) 选用 (3.4) 和 (4.10) 式，代入后即得

$$\frac{u(j,k+1)-u(j,k)}{\tau}+a\frac{u(j+1,k)-u(j,k)}{h}$$

$$-\frac{\tau}{2}u''_{t^2}(x_j,\widetilde{t_k})-a\frac{h}{2}u''_{x^2}(\widetilde{x_j},t_k)=0$$

我们把

$$R_{hk}^{(1)}=\frac{\tau}{2}u''_{t^2}(x_j,\widetilde{t_k})+a\frac{h}{2}u''_{x^2}(\widetilde{x_j},t_k)=O(\tau+h)$$

叫做截断误差项。当略去截断误差项，并用u_j^k来表示$u(j,k)$的近似值，则得到

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}+a\frac{u_{j+1}^k-u_j^k}{h}=0$$

令$r=\tau/h$为网比，则上式可写成

$$u_j^{k+1}=u_j^k-ar(u_{j+1}^k-u_j^k). \tag{4.13}$$

(4.13) 用到的网格的节点，如图7.10所示。

若对t采用向前差商(3.4) 而对x选用向后差商 (4.11) 近似代替，则得到

$$u_j^{k+1}=u_j^k-ar(u_j^k-u_{j-1}^k) \tag{4.14}$$

它所用到的节点如图7.11所示。

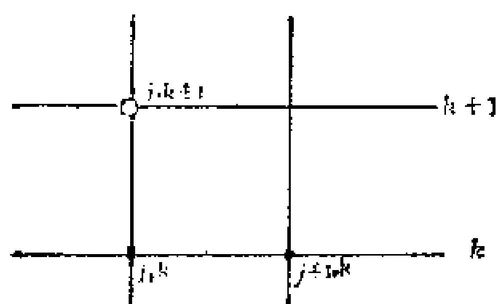


图 7.10

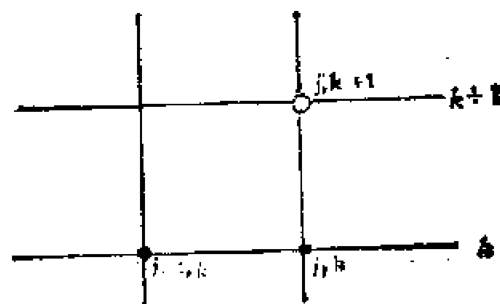


图 7.11

而其截断误差项为：

$$R_{hk}^{(2)}=\frac{\tau}{2}u''_{t^2}(x_j,\widetilde{t_k})-a\frac{h}{2}u''_{x^2}(\widetilde{x_j},t_k)=O(\tau+h)$$

以上两种差分格式又称做偏心格式。

若对 t 仍然采用向前差商（3.4）而对 x 选用中心差商（4.12）近似代替，则得到：

$$u_j^{k+1} = u_j^k - \frac{ar}{2}(u_{j+1}^k - u_j^k) \tag{4.15}$$

用到网格上的节点如图7.12所示。

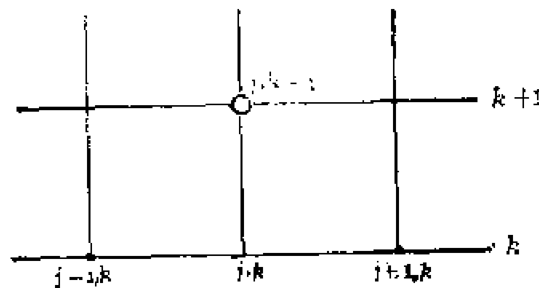


图　7.12

其截断误差为：

$$R_{h\tau}^{(3)} = \frac{\tau}{2} u''_{t^2}(x_j, \tilde{t}_k) + \frac{ah^2}{3} u_{x^3}^{(3)}(\tilde{\tilde{x}}_j, t_k) = O(\tau + h^2),$$

格式（4,13），（4.14）和（4.15）有一个共同特点，就是当初始值

$$u(x_j, 0) = \varphi(x_j) \tag{4.16}$$

给定以后，第一层节点上的 $u(x_j, t_0)$ 就可以逐个计算出来，一般的当第 k 层的 u_j^k 值算好以后，就可以算出 $k+1$ 层上 u_j^{k+1} 的值，这种格式叫做显格式。

2　隐格式

我们对 t 采用向后差商（3.5），而对 x 选用中心差商（4.12），如果略去截断误差项，取近似值，则有

$$u_j^{k+1} + \frac{ar}{2}(u_{j+1}^{k+1} - u_{j-1}^{k+1}) = u_j^k \tag{4.17}$$

（4.17）式所用网格上的节点如图7.13所示。

它的截断误差项为：

$$R_{jk}^{(4)} = \frac{\tau}{2}u''_{t^2}(x_j, \bar{\bar{t_k}}) - \frac{ah^2}{3}u_{x^3}^{(3)}(\bar{\bar{x_j}}, t_k) = O(\tau + h^2)$$

格式（4.17）和前面几种格式不同，当知道初始值（4.16）以后，要算出第一层上的值必须解联立方程组才可以，这种格式叫做隐格式。

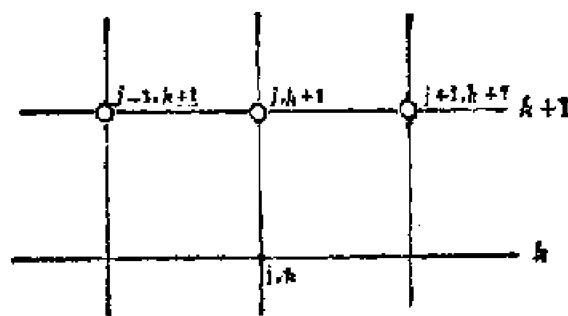


图 7.13

从上面建立差分格式过程中，可以看出，当步长 τ，$h \to 0$时，各差分格式略去余项也随之趋向于零，这说明差分格式的极限就是相应的微分方程，此时就说差分方程与相应的微分方程是相容的，或称做相容逼近。相容和收敛是不同的，一般说来相容性是不能保证收敛性的，但在许多情况下，差分格式的相容性再加上稳定性，就可以保证收敛性。这就是 *Lax*等价定理。因此下面我们可以致力于研究差分格式的稳定性问题。

下面我们讨论上面四种差分格式的稳定性.

3　稳定性

我们仍然用富氏法讨论上述四种格式的稳定性问题。

与差分方程（4.13）所对应的误差方程是：

$$\varepsilon_j^{k+1} = \varepsilon_j^k - ar(\varepsilon_{j+1}^k + \varepsilon_j^k) \tag{4.18}$$

假定误差具有谐波形式

$$\varepsilon_j^k = G^k e^{i\alpha jh}$$

代入（4.18）则得特征方程：

$$G^{k+1}e^{i\alpha jh} = G^k e^{i\alpha jh} - ar(G^k e^{i\alpha(j+1)h} - G^k e^{i\alpha jh})$$

两边消去共同因子 $G_k e^{i\alpha jh}$，则有

$$G = 1 - ar(e^{inh} - 1)$$
$$= (1 + ra) - ar(\cos nh + i\sin nh)$$
$$= 1 + ar(1 - \cos nh) - iar\sin nh$$

则

$$G = 1 + 2ar\sin^2\frac{nh}{2} - 2ar\, i\sin\frac{nh}{2}\cos\frac{nh}{2} \qquad (4.19)$$

于是

$$|G|^2 = (1 + 2ar\sin^2\frac{nh}{2})^2 + (2ar\sin\frac{nh}{2}\cos\frac{nh}{2})^2$$
$$= 1 + 4ar(1 + ar)\sin^2\frac{nh}{2} \qquad (4.20)$$

因此，要格式（4.13）稳定必须要有$a<0$，$-1\leqslant ar\leqslant 0$时$|G|^2\leqslant 1$，当$a>0$时不论$r>0$情形如何都有$|G|>1$此时差分格式（4.13）是不稳定的。

（4.14）的特征方程是

$$G = 1 - ar + are^{-inh} \qquad (4.21)$$

从（4.21）容易推出

$$G = 1 - ar + ar(\cos nh - i\sin nh)$$
$$= 1 - ar(1 - \cos nh) - ari\sin nh)$$
$$= 1 - 2ar\sin^2\frac{nh}{2} - i2ar\sin\frac{nh}{2}\cos\frac{nh}{2} \qquad (4.22)$$

于是便有

$$|G|^2 = (1 - 2ar\sin^2\frac{nh}{2})^2 + (2ar\sin\frac{nh}{2}\cos\frac{nh}{2})^2$$
$$= 1 - 4ra\sin^2\frac{nh}{2} + 4a^2r^2\sin^2\frac{nh}{2}$$
$$= 1 - 4ar(1 - ar)\sin^2 nh \qquad (4.23)$$

当$a>0$，$0\leqslant ar\leqslant 1$时，$|G|^2\leqslant 1$，格式（4.14）是稳定的

由于差分格式（4.15）的特征方程为：

$$G = 1 - \frac{ar}{2}(e^{inh} - e^{-inh}) = 1 - iar\sin nh$$

所以得

$$|G|^2=1+a^2r^2\sin^2 nh>1$$

对任何 r 都成立，因此差分格式（4.15）是恒不稳定的。

隐格式（4.17）是稳定的，请读者自己证明。

值得注意的是，格式（4.13），当 $a<0$，$-1\leqslant ar\leqslant 0$时是稳定的，而 $a>0$时，不论 r 取何值都不稳定，而（4.14）格式，当 $a>0$，$0\leqslant ar\leqslant 1$时稳定，$a<0$，$-1\leqslant ar<0$不稳定，为了正确的使用差分格式，保证稳定性，从上面分析我们可以得出当$a>0$时，应取左偏格式（4.14），当$a<0$时，应取右偏格式（4.13）。

习　题 7.4

1　双曲型方程为

$$\begin{cases}\dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2}-a^2\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}=0,\ 0<x<l,\ 0<t<T & (1)\\ u(x,0)=\varphi(x),\dfrac{\partial u(x,0)}{\partial t}=\varphi(x),0\leqslant x\leqslant l & (2)\\ u(0,t)=\mu_1(t),u(l,t)=\mu_2(t),0\leqslant t\leqslant T & (3)\end{cases}$$

构造其差分格式。

2　试用上式显格式（1）解下述混合问题

$$\begin{cases}\dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2}-\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}=0,\quad 0<x<1,\ t>0\\ u(x,0)=\sin\pi x,\dfrac{\partial u(x,0)}{\partial t}=x(1-x),\ 0\leqslant x\leqslant 1\\ u(0,t)=u(1,t)=0,\quad t\geqslant 0\end{cases}$$

3　解方程

$$\begin{cases}\dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2}=\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2},\qquad 5<x<10,t>0\\ u(x,0)=x-1,5<x<10\\ \dfrac{\partial u}{\partial t}\Big|_{t=0}=0,\\ u(5,t)=u(10,t)=0\end{cases}$$

§5 变分原理

有限元方法是近十几年发展起来的一种计算方法。它在结构力学，弹性力学，流体力学，热传导和电磁场计算等方面有着广泛的应用。

它的基础分为两部分，第一部分是变分原理，它是里兹——加辽金方法的一种变形。第二部分是剖分插值，它是差分法的一种变形。有限元方法是把这两类方法相结合，取长补短而进一步发展的结果。

目前国内外，关于有限元的资料很多，多数是从力学问题来说明问题的。这里我们主要是从数学方面来对有限元方法作一些必要的叙述，企图勾画出有限元的一些特性，便于与差分法等进行比较。

因为变分原理和剖分插值是有限元方法的基础。首先我们对变分原理作以简要介绍，然后再用有限元方法解决边值问题。

我们从常微分方程入手，来介绍变分原理，然后再以二维的泊松方程边值问题为模型来说明有限元方法。

（一）我们用一个物理上的例子来说明变分原理的基本思想。

例如：一根长为 l 的等截面积弹性直杆，横截面积为 S，密度为 ρ，弹性模量为 E，杆的上端固定，下端自由，求在自重作用下杆各点的位移。

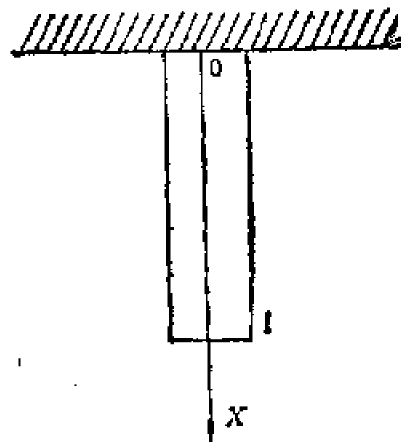


图 7.14

如图所示，我们沿杆轴建立坐标 $0x$，上端 $x=0$，下端 $x=l$。设各截面处的轴向位移为 $u=$

$u(x)$，则从弹性力学知识可知位移 $u(x)$满足的方程是：

$$E\frac{d^2u}{dx^2}+\rho g=0 \qquad (5.1)$$

其中 g 是重力加速度，因为在$x=0$处 $u=0$，在$x=l$ 处 $g=0$，所以$u(x)$满足边界条件

$$u(0)=u'_x(l)=0 \qquad (5.2)$$

于是，求解位移$u(x)$归结为解微分方程边值问题

$$\begin{cases} E\dfrac{d^2u}{dx^2}+\rho g=0 \\ u(0)=0 \\ u'_x(l)=0 \end{cases} \qquad (5.3)$$

然而，如果从能量极值的角度来看，因为杆与外荷载构成的总势能应为

$$J(u)=\int_0^l\frac{S}{2}E\left(\frac{du}{dx}\right)^2dx-\int_0^l s\rho gudx \qquad (5.4)$$

求解$u(x)$就应是求在满足边值条件（5.2）的函数中，使(5.4)取极小值的函数，反映杆各点位移状态，由此即知研究杆在自重下各点位移问题，便成为在（5.2）条件下，求积分（5.4）的极小值问题。

定理（等价性定理） 如果$u(x)$是（5.3）的解，则 $u(x)$使$J(u)$达到极小，反之，如果 $u(x)$使（5.4）$J(u)$达到极小，则$u(x)$一定是边值（5.3）问题的解。

证明 设函数$y(x)$给出积分（5.4）的最小值。即

$$J(u)\geqslant J(y)$$

且满足边值条件

$$y(0)=0,\ y'(l)=0$$

设$\eta(x)$是任一足够光滑的函数，适合条件

$$\eta(0)=0,\ \eta'(l)=0$$

设 a 为任意实数，则函数$y(x)+a\eta(x)$适合

$$y(0)+a\eta(0)=0,\ y'(l)+a\eta'(l)=0$$

所以对任何一个实数 a，函数 $y(x)+a\eta(x)$ 适合边值条件（5.2）。

于是应有

$$J(y+a\eta)\geqslant J(y)$$

由于积分 $J(y+a\eta)$ 为 a 的函数，当 $a=0$ 时其值为 $J(y)$ 为最小，所以应有

$$\frac{d}{da}J(y+a\eta)=0 \tag{5.5}$$

而

$$\frac{d}{da}J(y+a\eta)=\frac{d}{da}\left[\int_0^l \frac{S}{2}E\left(\frac{dy}{dx}+a\frac{d\eta}{ax}\right)^2 dx - \int_0^l s\rho g(y+a\eta)dx\right]$$

$$=S\left[\int_0^l E\left(\frac{dy}{dx}+a\frac{d\eta}{dx}\right)\frac{d\eta}{dx}dx-\int_0^l \rho g\eta dx\right]$$

所以根据（5.5）就有

$$S\int_0^l E\frac{dy}{dx}\frac{d\eta}{dx}dx-S\int_0^l \rho g\eta dx=0 \tag{5.6}$$

利用分部积分，并注意到 $\eta(0)=y'(l)=0$，应有

$$\int_0^l E\frac{dy}{dx}\frac{d\eta}{dx}dx=E\frac{dy}{dx}\cdot\eta\Big|_0^l-\int_0^l \eta\frac{d}{dx}\left(E\frac{dy}{dx}\right)dx$$

$$=-\int_0^l \eta\frac{d}{dx}\left(E\frac{dy}{dx}\right)dx$$

代入（5.6）就有

$$-S\int_0^l \eta\frac{d}{dx}\left(E\frac{dy}{dx}\right)dx-S\int_0^l \rho g\eta dx=0$$

或写成

$$S\int_0^l\left[\frac{d}{dx}\left(E\frac{dy}{dx}\right)+\rho g\right]\eta dx=0 \tag{5.7}$$

以上分析说明，如果 $y(x)$ 给出积分（5.4）极小值，那么对于任何上述 $\eta(x)$（5.7）都应成立。而这只有（5.7）中方括号内

式子为零时才可能，即必须有

$$\frac{d}{dx}\left(E\frac{dy}{dx}\right)+\rho g=0$$

于是，给出积分（5.4）极小值的那个函数 $y(x)$，应是边值问题（5.3）的解。

反之，设 $y(x)$为边值问题（5.3）解，则 $y(x)$ 是（5.4）的极小值，即

$$\begin{aligned}
J(y+a\eta) &= \frac{s}{2}\int_0^l E\left(\frac{d(y+a\eta)}{dx}\right)^2 dx - s\int_0^l \rho g(y+a\eta)dx \\
&= \frac{s}{2}\int_0^l E\left(\frac{dy}{dx}\right)^2 dx + s\int_0^l aE\frac{dy}{dx}\,\frac{d\eta}{dx}dx + \\
&\quad \frac{s}{2}\int_0^l a^2E\left(\frac{d\eta}{ax}\right)^2 dx - s\int_0^l \rho gy dx - s\int_0^l a\rho g\eta dx \\
&= J(y)+\frac{s}{2}\int_0^l a^2E\left(\frac{d\eta}{dx}\right)^2 dx + \\
&\quad + s\int_0^l aE\frac{dy}{dx}\,\frac{d\eta}{dx}dx - s\int_0^l a\rho g\eta dx
\end{aligned}$$

对 $s\int_0^l aE\frac{dy}{dx}\,\frac{d\eta}{dx}dx$进行分部积分，并注意 $y'(l)=0$，$\eta(o)=0$，于是有

$$\begin{aligned}
s\int_0^l aE\frac{dy}{dx}\,\frac{d\eta}{dx}dx &= s\left[-\int_0^l a\frac{d}{dx}\left(E\frac{dy}{dx}\right)\eta(x)dx + \right. \\
&\quad \left. + aE\frac{dy}{dx}\eta(x)\Big|_0^l\right] \\
&= -s\left[\int_0^l a\frac{d}{dx}\left(E\frac{dy}{dx}\right)\eta(x)dx\right.
\end{aligned}$$

因此

$$\begin{aligned}
J(y+a\eta) &= J(y)+\frac{s}{2}\int_0^l a^2E\left(\frac{d\eta}{ax}\right)^2 dx \\
&\quad - sa\int_0^l\left[\frac{d}{dx}\left(E\frac{dy}{dx}\right)+\rho g\right]\eta dx
\end{aligned}$$

因为 $y(x)$是边值问题（5.3）的解，便有

$$\frac{d}{dx}\left(E\frac{dy}{dx}\right)+\rho g=0$$

所以

$$J(y+a\eta)=J(y)+\frac{s}{2}\int_0^l a^2E\left(\frac{d\eta}{dx}\right)^2dx \qquad (5.8)$$

又 $E>0$，则

$$J(y+a\eta)\geqslant J(y)\ （对任何\ a）$$

微分方程边值问题（5.3）的解 $y(x)$，使（5.4）$J(y)$ 达到极小。

对偏微分方程来说有完全类似的情况，即求偏微分方程边值问题

$$\begin{cases}\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2}=f(x,y),\ (x,y)\epsilon G\\ u|_\Gamma=\varphi(M)\end{cases} \qquad (5.9)$$

的解，等价找使积分

$$J(u)=\frac{1}{2}\iint_G\left(\frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial u}{\partial y}\frac{\partial u}{\partial y}\right)dxdy-$$
$$-\iint_G f(x,y)udxdy \qquad (5.10)$$

达到极小值的那个函数。

通过上面证明过程可以看到：一个物理问题虽然有两种不同的数学描述形式，然而，求微分方程边值问题的解，可以通过求使积分达到极小值的函数来实现。不过求使$J(u)$达到极小的函数$u(x)$，比求相应的微分方程的解要求的低。这样就会给我们带来很多方便。

（二）里兹—加辽金(Ritz—ГалеркNн)方法

前面我们已经讨论了如何化边值问题为等价变分问题。下面讨论如何求解相应的变分问题。里兹—加辽金方法是最主要

的一种近似方法，它是讨论有限元方法的基础。

设V_n是n维空间，ψ_1，ψ_2，…，ψ_n是V_n的坐标函数（或基底）。V_n中任一元素$y_n(x)$可表为

$$y_n=\sum_{j=1}^{n}a_j\psi_j(x) \tag{5.11}$$

里兹法是选取a_j，使$J(y_n(x))$取极小，就是说选取一切可能的a_j，使积分

$$J(y_n(x))=\frac{s}{2}\int_0^l E\left(\sum_{j=1}^{n}a_j\psi_j'(x)\right)^2dx-\int_0^l\rho g\sum_{j=1}^{n}a_j\psi_j(x)dx \tag{5.12}$$

达到极小值问题。（5.12）是$a_1,a_2,\cdots,a_n$的多元函数，从而问题化为通常的多元函数的极值问题，因此，a_j的选取应满足

$$\frac{\partial}{\partial a_j}J(y_n(x))=0,j=1,2,\cdots,n$$

即知$a_1,a_2,\cdots\cdots$，a_n满足

$$\sum_{j=1}^{n}a_{kj}a_j=\beta_k,k=1,2,\cdots\cdots,n \tag{5.13}$$

其中

$$a_{kj}=\int_0^l sE\psi_j'(x)\psi_k'(x)dx \tag{5.14}$$

$$\beta_k=\int_0^l s\rho g\psi_k(x)dx \tag{5.15}$$

（5.13）是线性代数方程组，求出a_j后，代到（5.11）中，便得到近似解$y_n(x)$，这就是里兹方法。

加辽金方法也是取一n维空间V_n，把$y_n(x)\in V_n$表成（5.11）。但要求a_j使$y_n(x)$关于V_n中任意元素都满足（5.4）

值得注意的是里兹法基于极小位能原理，而加辽金方法是基于虚功原理，后者比前者的应用广泛得多。它们之间即有联系又有区别。换言之

$$\sum_{j=1}^{n} a_{kj} a_j = \beta_k, k = 1, 2, \cdots\cdots, n$$

其中 a_{kj}, β_k 与（5.14），（5.15）相同，这和里兹方法导出的方程组（5.13）相同，因此习惯上称（5.13）为里兹—加辽金方程．

例　用里兹—加辽金方法解边值问题

$$\begin{cases} L(u) = u'' + u = -x, 0 < x < 1 \\ u(0) = u(1) = 0 \end{cases} \tag{5.16}$$

的近似解．

解　取坐标函数为

$$\psi_j(x) = x(1-x)x^{j-1}, \quad j = 1, 2, \cdots\cdots$$

$\psi_j(x)$满足边值条件，即

$$\psi_j(0) = 0$$

$$\psi_j(1) = 0$$

将近似解 $y_n(x)$表成

$$y_n(x) = \sum_{j=1}^{n} a_j \psi_j(x) = x(1-x) \times$$
$$\times (a_1 + a_2 x + \cdots + a_n x^{n-1})$$

当$n=1$，则有

$$\left(\int_0^1 L(\psi_1)\psi_1 dx\right) a_1 = -\int_0^1 x\psi_1 dx \tag{5.17}$$

将 $\psi_1(x) = x(1-x)$ 代入上式，得

$$\int_0^1 L(\psi_1)\psi_1 dx = \int_0^1 (\psi_1'' + \psi_1)\psi_1 dx$$
$$= \int_0^1 [-2 + x(1-x)] x(1-x) dx$$
$$= -\frac{3}{10}$$

$$\int_0^1 x\psi_1 dx = \int_0^1 x^2(1-x)\, dx = \frac{1}{12}$$

代入（5.17），解得 $a_1 = \frac{5}{18}$，由此求出

$$y_1(x)=a_1\psi_1(x)=\frac{5}{18}x(1-x)$$

当$n=2$时，则有

$$\begin{cases}\left(\int_0^1 L(\psi_1)\psi_1dx\right)a_1+\left(\int_0^1 L(\psi_2)\psi_1dx\right)a_2 \\ \quad =-\int_0^1 x\psi_1dx \\ \left(\int_0^1 L(\psi_1)\psi_2dx\right)a_1+\left(\int_0^1 L(\psi_2)\psi_2dx\right)a_2 \\ \quad =-\int_0^1 x\psi_2dx \end{cases} \tag{5.18}$$

$$\psi_1(x)=x(1-x)$$

$$\psi_2(x)=x^2(1-x)$$

$$y_2=x(1-x)(a_1+a_2x)$$

注意

$$\int_0^1 L(\psi_1)\psi_2dx=\int_0^1 L(\psi_2)\psi_1dx$$

$$=\int_0^1[-2+x(1-x)]x^2(1-x)dx$$

$$=-\frac{3}{20}$$

$$\int_0^1 L(\psi_2)\psi_2dx=\int_0^1[2(1-x)-4x+x^2(1-x)]x^2(1-x)dx=-\frac{13}{105}$$

$$\int_0^1 x^3(1-x)dx=\frac{1}{20}$$

将上面计算结果代入（5.8）中，得到里兹一加辽金方程

$$\begin{cases}-\frac{3}{10}a_1-\frac{3}{20}a_2=-\frac{1}{12} \\ -\frac{3}{20}a_1-\frac{3}{105}a_2=-\frac{1}{20}\end{cases}$$

由此解出$a_1=\frac{71}{369}$，$a_2=\frac{7}{41}$，于是

$$y_2(x)=x(1-x)\left(\frac{71}{369}+\frac{7}{41}x\right)$$

容易验证边值问题（5.16）的精确解为$y(x)=\frac{\sin x}{\sin 1}-x$。

于 $x=\frac{1}{4}$，$\frac{1}{2}$，$\frac{3}{4}$点，把$y_1(x)$，$y_2(x)$与精确解$y(x)$进行比较，结果列入下表。

x	$y(x)$	$y_1(x)$	$y_2(x)$
$\frac{1}{4}$	0.044	0.052	0.044
$\frac{1}{2}$	0.070	0.069	0.069
$\frac{3}{4}$	0.060	0.052	0.060

由此可见，一次近似的误差在0.01左右，二次近似的误差在0.001左右。

§6　剖分和有限元法

我们仍以微分方程边值问题（5.3）为例来说明有限元法的求解过程，根据前面讨论，求解（5.3），等价于求积分（5.4）在（5.2）边值条件下的极值问题。

我们首先对区间$[0,l]$进行剖分，分成n个小区间，即

$$0=x_0<x_1<\cdots\cdots<x_{n-1}<x_n=l$$

把每个小区间$[x_k,x_{k+1}]$叫做一个单元，记作e_k．单元长度$h_k=x_{k+1}-x_k$。

在第k个单元内，用线性插值函数：

$$u_k(x)=\frac{1}{h_k}[(x-x_k)u_{k+1}+(x_{k+1}-x)u_k] \qquad (6.1)$$

唯一确定，其几何形状如图7.15

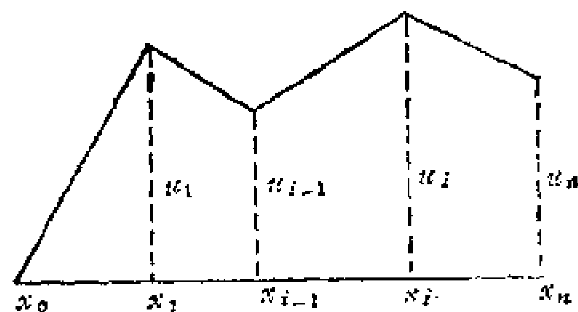


图 7.15

其中u_k为$u(x)$在x_k点值，这样就整个区间〔0、l〕上用连续折线函数：

$$\widetilde{u(x)} = \begin{cases} u_0(x) & x \in [x_0, x_1] \\ u_1(x) & x \in [{}_1x, x_2] \\ \cdots\cdots & \\ u_{n-1}(x) & x \in [x_{n-1}, x_n] \end{cases} \tag{6.2}$$

来代替$u(x)$。显然$\widetilde{u(x)}$满足边界条件的，于是我们只对$\widetilde{u(x)}$这样的函数求积分$J(\widetilde{u})$的极小值即可。区间〔0, l〕在上面的剖分之下，$J(\widetilde{u})$实际只依赖于$u_0, u_1, \cdots, u_n$这$n+1$个数。因此$J(\widetilde{u})$可以看成$n+1$个数的多元函数。使$J(\widetilde{u})$达到极小值的u_j，应适合方程组。

$$\frac{\partial}{\partial u_k} J(\widetilde{u}) = 0, \quad k = 0, 1, \cdots, n \tag{6.3}$$

将$\widetilde{u(x)}$代入（5.4），则有

$$\begin{aligned} J(\widetilde{u}) &= \frac{s}{2}\int_0^l E(\widetilde{u'}(x))^2 dx - s\int_0^l \rho g\widetilde{u}(x)dx \\ &= \sum_{j=0}^{n-1}\left\{\frac{S}{2}\int_{x_j}^{x_{j+1}} E(\widetilde{u'}(x))^2 dx \right. \\ &\quad \left. - s\int_{x_j}^{x_{j+1}} \rho g\widetilde{u(x)}dx\right\} \\ &= \sum_{j=1}^{n-1}\left\{\frac{S}{2}\int_{x_j}^{x_{j+1}} E(u'_j(x))^2 dx \right. \\ &\quad \left. - s\int_{x_j}^{x_{j+1}} \rho g u_j(x)dx\right\} \end{aligned} \tag{6.4}$$

由（6.1）可知

$$(u'_j(x))^2=\frac{1}{h_j^2}(u_{j+1}-u_j)^2 \tag{6.5}$$

因此

$$\begin{aligned}J(\widetilde{u})=\sum_{j=0}^{n-1}\Big\{&\frac{s}{2}\int_{x_j}^{x_{j+1}}E\frac{1}{h_j^2}(u_{j+1}-u_j)^2dx\\&-s\int_{x_j}^{x_{j+1}}\rho g\frac{1}{h_j}[(x-x_j)u_{j+1}\\&+(x_{j+1}-x)u_j]dx\Big\}\end{aligned} \tag{6.6}$$

现在对$u_k(k=0,1,2,\cdots,n)$求导，注意k从0——$n-1$的各个小区间中，只有$[x_{k-1},x_k]$和$[x_k,x_{k+1}]$这两个小区间上的积分与u_k有关，其余的都与u_k无关，因此对u_k求导都为零。这样一来，对每一个u_k求导都只有两项，即

$$\begin{aligned}\frac{\partial J(\widetilde{u})}{\partial u_k}=\frac{\partial}{\partial u_k}\Big\{&\frac{s}{2}\int_{x_{k-1}}^{x_k}E\frac{1}{h_{k-1}^2}(u_k-u_{k-1})^2dx\\&+\frac{s}{2}\int_{x_k}^{x_{k+1}}E\frac{1}{h_k^2}(u_{k+1}-u_k)^2dx\\&-s\int_{x_{k-1}}^{x_k}\rho g\frac{1}{h_{k-1}}[(x-x_{k-1})u_k\\&+(x_n-x)u_{k-1}]dx\\&-s\int_{x_k}^{x_{k+1}}\rho g\frac{1}{h_k}[(x-x_k)u_{k+1}\\&+(x_{k+1}-x)u_k]dx\Big\}\\=&\frac{sE}{h_{k-1}}(u_k-u_{k-1})-\frac{sE}{h_k}(u_{k+1}-u_k)\\&-\frac{s\rho g}{2}(h_{k-1}+h_k)=0\end{aligned} \tag{6.7}$$

从上面推导过程中可以看出，第k个方程只有e_k和e_{k-1}这两个单元有用。而每一个单元e_j又只对第j和$j+1$这两个方程起作用。我们把上面的方程引进符号$k_{im}^{(j)}$来表示u_m的系数，其中k的上方的指数j表示单元，i表示方程的号码，下方后一个

指数m，表示u_m前的系数。$g_i^{(k-1)}$和$g_i^{(k)}$是用来表示第$k-1$个单元和第k个单元对第k个方程的贡献，不过它是与u_j无关的常数项。另外还得指出，第一个方程和最后一个方程，因u_0和u_n只与一个单元有关，因此形式略有区别，现将它排列于下：

$$\begin{cases} k_{00}^{(0)}u_0 + k_{01}^{(0)}u_1 = g_0^{(0)} \\ k_{j,j-1}^{(j-1)}u_{j-1} + (k_{jj}^{(j-1)} + k_{jj}^{(j)})u_j + k_{j,j+1}^{(j)}u_{j+1} \\ \quad = g_j^{(j-1)} + g_j^{(j)} \\ \qquad\qquad\qquad\qquad i = 1, 2, \cdots, n-1 \\ k_{n,n-1}^{(n-1)}u_{n-1} + k_{nn}^{(n-1)}u_n = g_n^{(n-1)} \end{cases} \tag{6.8}$$

把上面方程组用矩阵表示，则

$$KU = G \tag{6.9}$$

系数矩阵k我们叫做刚度矩阵，$U=(u_0, u_1, \cdots u_n)^T$，$G$是右端项。如果我们把一个单元$e_j$对方程组的贡献写成

$$\begin{pmatrix} k_{jj}^{(j)} & k_{j,j+1}^{(j)} \\ k_{j+1,j}^{(j)} & k_{j+1,j+1}^{(j)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_j \\ u_{j+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_j^{(j)} \\ g_{j+1}^{(j)} \end{pmatrix} \tag{6.10}$$

其中

$$K^{e_j} = \begin{pmatrix} k_{jj}^{(j)} & k_{j,j+1}^{(j)} \\ k_{j+1,j}^{(j)} & k_{j+1,j+1}^{(j)} \end{pmatrix}$$

叫做单元e_j的单元刚度矩阵。而刚度矩阵是由这些单元刚度矩阵迭加而得到的。即

$$k = \begin{bmatrix} k_{00}^{(0)} & k_{01}^{(0)} & & & & & \\ k_{10}^{(0)} & k_{11}^{(0)} + k_{11}^{(1)} & k_{12}^{(1)} & & & & \\ & k_{21}^{(1)} & k_{22}^{(1)} + k_{22}^{(2)} & k_{23}^{(2)} & & & \\ & & k_{32}^{(2)} & k_{33}^{(2)} + k_{33}^{(3)} & & & \\ & & & & \ddots & & \\ & & & & k_{n-1,n-1}^{(n-2)} + k_{n-1,n-1}^{(n-1)} & k_{n-1,n}^{(n-1)} \\ & & & & & k_{n,n-1}^{(n-1)} & k_{nn}^{(n-1)} \end{bmatrix} \tag{6.11}$$

这个系数矩阵K是对称的三对角矩阵，因此求解是较容易的，但是在求解以前必须对边界条件进行处理．例如在我们的例题中，端点$u(0)=0$,为此我们令矩阵K中的第一行第一列元素除对角元素为1以外其余全部为零，右端项也为零．这样保证解出的$u_0=0$，而解出来的$u_0, u_1, \cdots, u_n$所构成的折线函数$\widetilde{u}(x)$，在适当条件下，可以证明是真解的一个近似解．

下面我们把上面例子将区间$[0,l]$四等分，即$h_0=h_1=h_2=h_3=\frac{l}{4}$，则每个单元的长度都是一样，所以容易求得

$$k^{(0)}=k^{(1)}=k^{(2)}=k^{(3)}=\frac{4sE}{l}\begin{pmatrix}1 & -1\\ -1 & 1\end{pmatrix}$$

同样可以得到

$$g_1=g_2=g_3=\frac{\rho g s l}{4}$$

$$g_0=g_4=\frac{\rho g s l}{8}$$

于是（6.8）可以写成

$$\frac{4sE}{l}\begin{pmatrix}1 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & 2 & -1 & \\ & & -1 & 2 & -1\\ & & & -1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}u_0\\ u_1\\ u_2\\ u_3\\ u_4\end{pmatrix}=\frac{\rho g s l}{4}\begin{pmatrix}\frac{1}{2}\\ 1\\ 1\\ 1\\ \frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

利用边界条件$u_0=0$得

$$\begin{pmatrix}1 & 0 & & & \\ 0 & 2 & -1 & & \\ & -1 & 2 & -1 & \\ & & -1 & 2 & -1\\ & & & -1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}u_0\\ u_1\\ u_2\\ u_3\\ u_4\end{pmatrix}=\frac{\rho g l^2}{16E}\begin{pmatrix}0\\ 1\\ 1\\ 1\\ \frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

解此方程组得

$$u_0=0, \qquad u_2=3\frac{\rho ul^2}{8E}, \qquad u_4=\frac{\rho gl^2}{2E}$$

$$u_1=3.5\frac{\rho gl^2}{16E}, \quad u_3=7.5\frac{\rho gl^2}{16E}$$

这和方程（5.3）的真解

$$u(x)=\frac{\rho g}{E}x(1-\frac{x}{2})$$

在各节点上的值完全一样，而在其它点的值可以从图7.16中看到，有限元的解$\widetilde{u}(x)$与真解$u(x)$逼近程度。

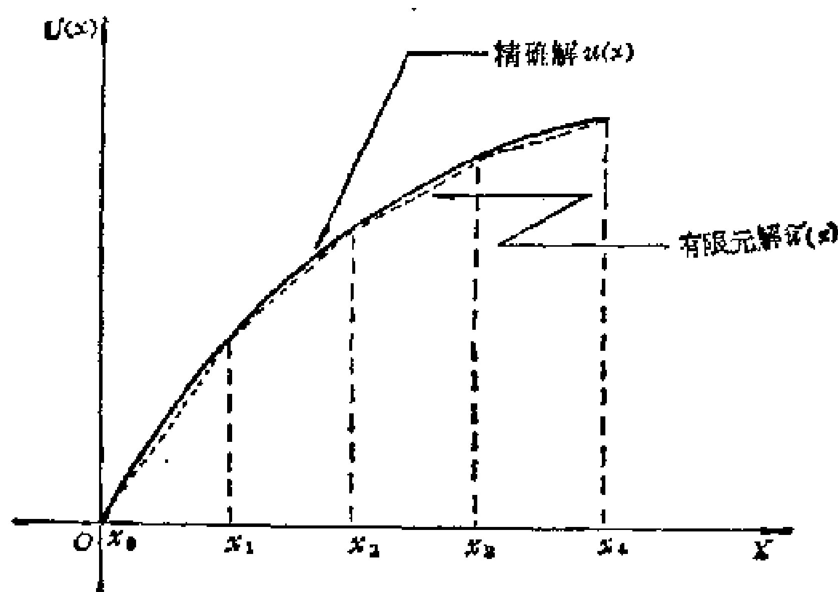


图 7.16

有限元方法实际上解决了Ritz—Галеркин方法坐标 函 数 的选取问题。它给出了选取坐标函数的一种方法，即

$$\varphi_i(x)=\begin{cases}0 & x\leqslant 0\\ \dfrac{1}{h_{j-1}}(x-x_{j-1}) & x_{j-1}\leqslant x\leqslant x_j\\ \dfrac{1}{h_j}(x_{j+1}-x) & x_j\leqslant x\leqslant x_{j+1}\\ 0 & x\geqslant x_{j+1}\end{cases} \qquad i=1,2,\cdots,n$$

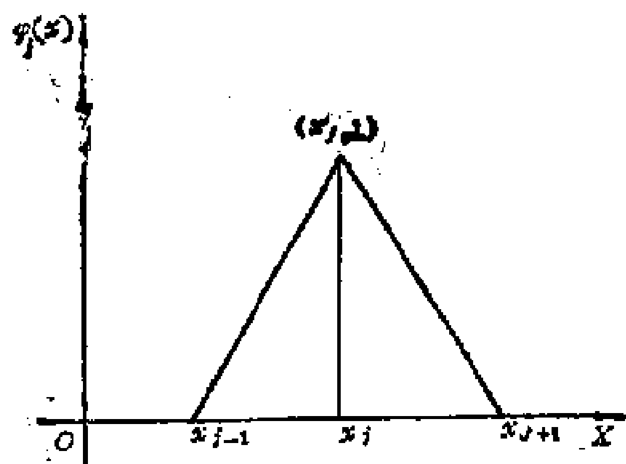


图 7.17

于是$\widetilde{u}(x)$可以用 $\varphi_j(x)$表示为

$$\widetilde{u}(x)=\sum_{j=1}^{n}u_j\varphi_j(x)$$

在这里待定系数为u_j，其中 $\varphi_j(x)$的选取有赖于分点坐标和分点个数。

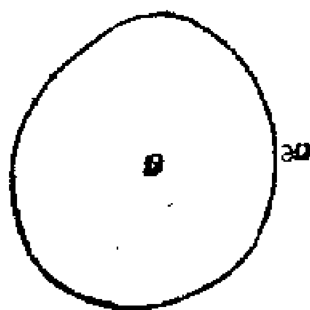


图 7.18

下面我们介绍平面的有限元方法。这里我们仅以泊松方程第一边值问题来说明二维的有限元方法。

设闭区域Ω上的 $u(x, y)$ 为连续函数，而且$u(x,y)$满足方程

$$\frac{\partial^2 a}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 a}{\partial y^2}=f(x,y),\quad (x,y)\in\Omega \tag{6.12}$$

$$u|\partial\Omega=\varphi \tag{6.13}$$

其中，$f(x,y)$, $\varphi(x)$ 为已知的而且具有一定光滑性。

我们首先对区域Ω进行剖分，在一维情形下只是长度不同，而形状一样，在平面上则可有各种不同的几何形状，如三角形，四边形等。设区域Ω被剖分成 $e_1, e_2, \cdots, e_N$ 即N个三角形单元。这N个三角形单元的和是Ω的一个近似记作 Ω_h。两

个单元之间不能有公共内点，每个单元的顶点可以是另一个单元的顶点（如图7.19），但决不允许一个单元的顶点是另一个单元边界中的点（如图7.20）。

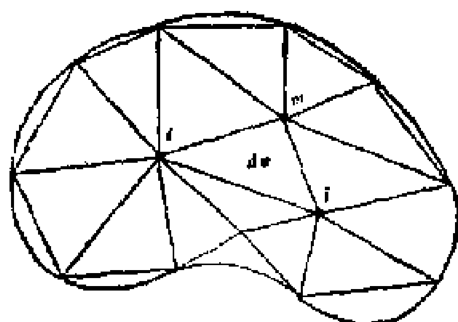


图 7.19

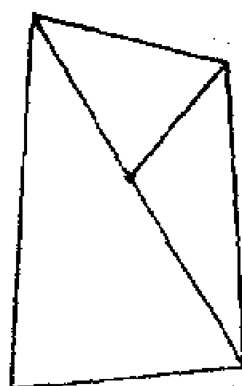


图 7.20

单元顶点如果在边界 $\partial\Omega$ 上，如图7.19即为已知的，在内部的点图7.19记“·”的为待求的，我们分别记 p_{n+1}, $\cdots, p_m$ 和 $p_1, p_2, \cdots, p_n$，在这些点处 $u(x_i, y_i) = u(p_i)$，我们记作 u_i。

我们仅就一个三角单元 Δe 来讨论，设三角单元 Δe 的三个顶点分别为 i，j，m，它们的坐标各为 (x_i, y_i)，(x_j, y_j)，(x_m, y_m)，且 i，j，m 按逆时针方向排列如图7.21。

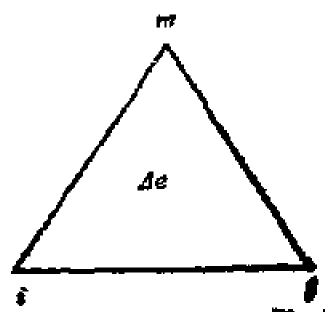


图 7.21

在 Δe 上以一个线性函数来近似这个单元上的精确值，即

$$u'(x, y) = \alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 y$$

其中，α_1, α_2, α_3 可以由三角形三个顶点的函数值、三个顶点坐标来确定，这是因为在三个顶点处，这个线性函数值有：

$$\begin{cases} \alpha_1 + \alpha_2 x_i + \alpha_3 y_i = u_i \\ \alpha_1 + \alpha_2 x_j + \alpha_3 y_j = u_j \\ \alpha_1 + \alpha_2 x_m + \alpha_3 y_m = u_m \end{cases}$$

系数矩阵行列式记作

$$\begin{vmatrix} 1 & x_i & y_i \\ 1 & x_j & y_j \\ 1 & x_m & y_m \end{vmatrix} = 2\Delta e$$

Δe此处表示三角形的面积，于是我们便求得，

$$\alpha_1 = \frac{1}{2\Delta e}\begin{vmatrix} u_i & x_i & y_i \\ u_j & x_j & y_j \\ u_m & x_m & y_m \end{vmatrix}, \quad \alpha_2 = \frac{1}{2\Delta e}\begin{vmatrix} 1 & u_i & y_i \\ 1 & u_j & y_j \\ 1 & u_m & y_m \end{vmatrix}$$

$$\alpha_3 = \frac{1}{2\Delta e}\begin{vmatrix} 1 & x_i & y_i \\ 1 & x_j & u_j \\ 1 & x_m & y_m \end{vmatrix}$$

从而

$$u^e(x, y) = \frac{1}{2\Delta e}[u_i(a_i + b_i x + c_i y) + u_j(a_j + b_j x + c_j y) + u_m(a_m + b_m x + c_m y)] \quad (6.14)$$

其中

$$a_i = x_j y_m - x_m y_j, \quad a_j = x_m y_i - x_i y_m, \quad a_m = x_i y_j - x_j y_i$$

$$b_i = y_j - y_m, \qquad b_j = y_m - y_i, \qquad b_m = y_i - y_j$$

$$c_i = x_m - x_j, \qquad c_j = x_i - x_m, \qquad c_m = x_j - x_i$$

而a_i, a_j, a_m；b_i, b_j, b_m；c_i, c_j, c_m和Δe都是依赖于三角形顶点坐标的已知数，所以$u(x, y)$只是u_i, u_j, u_m的函数，另外，还有

$$u_x^e(x, y) = \frac{1}{2\Delta e}(b_i u_i + b_j u_j + b_m u_m)$$

$$u_y^e(x, y) = \frac{1}{2\Delta e}(c_i u_i + c_j u_j + c_m u_m) \qquad (6.15)$$

令

$$N_i(x, y) = \frac{1}{2\Delta e}(a_i + b_i x + c_i y)$$

$$N_j(x,y)=\frac{1}{2\Delta e}(a_j+b_jx+c_jy)$$

$$N_m(x,y)=\frac{1}{2\Delta e}(a_m+b_mx+c_my) \tag{6.16}$$

则$u^e(x,y)$可表示为

$$u^e(x,y)=N_i(x,y)u_i+N_j(x,y)u_j+N_m(x,y)u_m$$

将每个单元上构造的函数$u^e(x,y)$合并起来就得到整个区域Ω_h上的分块近似函数．

$$\widetilde{u}(x,y)=u^e(x,y),\ (x,y)\in\Delta e \tag{6.17}$$

下面我们对函数$\widetilde{u}(x,y)$在区域Ω_h上来求积分

$$J(\widetilde{u})=\iint_{\Omega_h}\left[\frac{1}{2}(\widetilde{u}_x^2+\widetilde{u}_y^2)+f\widetilde{u}\right]dxdy$$

的极小值，在$J(\widetilde{u})$中可以自由选择的是$u_1,u_2,\cdots,u_n$，所以可看成是$u_1,u_2,\cdots,u_n$的n元函数的极小值，使得积分$J(\widetilde{u})$为极小的$u_1,u_2,\cdots,u_n$，应适合方程组

$$\frac{\partial}{\partial u_s}J(\widetilde{u})=0,\ s=1,2,\cdots,n \tag{6.18}$$

因为

$$\begin{aligned}J(\widetilde{u})&=\iint_{\Omega_h}\left[\frac{1}{2}(\widetilde{u}_x^2+\widetilde{u}_y^2)+f\widetilde{u}\right]dxdy\\&=\sum_{\Delta e}\iint_{\Delta e}\left[\frac{1}{2}(\widetilde{u}_x^2+\widetilde{u}_y^2))+f\widetilde{u}\right]dxdy\\&=\sum_{\Delta e}\iint_{\Delta e}\left[\frac{1}{2}(u_x^e)^2+(u_y^e)^2+fu^e\right]dxdy\\&=\sum_{\Delta e}\iint_{\Delta e}\left\{\frac{1}{2}\left(\left[\frac{1}{2\Delta e}(b_iu_i+b_ju_j+b_mu_m)\right]^2\right.\right.\\&\qquad\left.+\left[\frac{1}{2\Delta e}(c_iu_i+c_ju_j+c_mu_m)\right]^2\right)\\&\qquad\left.+f\cdot(N_iu_i+N_ju_j+N_mu_m)\right\}dxdy\end{aligned}$$

由（6.18）便有

$$\frac{\partial J(\tilde{u})}{\partial u_S}=\sum_{\Delta e}\iint_{\Delta e}\Big\{\frac{1}{4\Delta e^2}[(b_iu_i+b_ju_j+b_mu_m)$$
$$\times(b_i\delta_S^i+b_j\delta_S^j+b_m\delta_S^m)+(c_iu_i+c_ju_j+c_mu_m)$$
$$\times(c_i\delta_S^i+c_j\delta_S^j+c_m\delta_S^m)]+fN_i\delta_S^i+fN_j\delta_S^j$$
$$+fN_m\delta_S^m\Big\}dxdy$$
$$=0 \qquad s=1,2,\cdots,n \qquad (6.19)$$

其中δ_S^i是一个函数，当两个指标相同时积分等于1，否则积分为零．在这个方程中只与u_k有关的单元对方程才有贡献，其余的全为零，在一维情形里只与这个节点相邻的两个单元有关，在二维情形里比一维情形复杂得多，它与节点周围所有单元都有关，如图7.22。

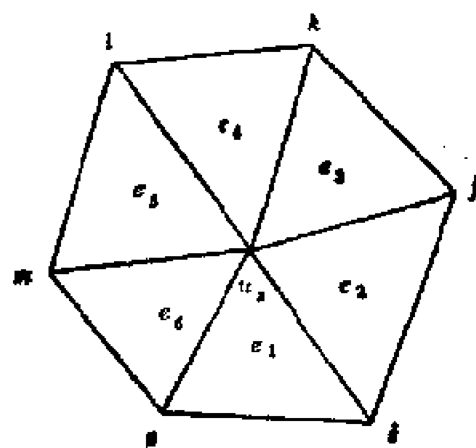


图 7.22

中u_S与周围六个单元$e_1, e_2, e_3, e_4, e_5, e_6$都有关，因此，$u_S$前面的系数为（用前面符号）．

$$k_{SS}^{e_1}+k_{SS}^{e_2}+k_{SS}^{e_3}+k_{SS}^{e_4}+k_{SS}^{e_5}+k_{SS}^{e_6}$$

在这个方程中还有

$$u_i, u_j, u_k, u_l, u_m, u_n,$$

这六个未知数．这些未知数前面的系数分别是

$$u_i:\ k_{Si}^{e_1}+k_{Si}^{e_2};\quad u_j:\ k_{Sj}^{e_2}+k_{Sj}^{e_3}$$
$$u_k:\ k_{Sk}^{e_3}+k_{Sk}^{e_4};\quad u_l:\ k_{Sl}^{e_4}+k_{Sl}^{e_5}$$
$$u_m:\ k_{Sm}^{e_5}+k_{Sm}^{e_6};\quad u_n:\ k_{Sn}^{e_6}+k_{Sn}^{e_1}$$

因此（6.19）表达式为

$$(k_{SS}^{e_1}+k_{SS}^{e_2}+k_{SS}^{e_3}+k_{SS}^{e_4}+k_{SS}^{e_5}+k_{SS}^{e_6})u_S$$
$$+(k_{Si}^{e_1}+k_{Si}^{e_2})u_i+(k_{Sj}^{e_2}+k_{Sj}^{e_3})u_j$$
$$+(k_{Sk}^{e_3}+k_{Sk}^{e_4})u_k+(u_{Sl}^{e_4}+u_{Sl}^{e_5})u_l$$
$$+(k_{Sm}^{e_5}+k_{Sm}^{e_6})u_m+(u_{Sn}^{e_6}+u_{Sn}^{e_1})u_n=g_S$$

其中g_S是常数项，并且由

$$g_S=\iint\limits_{e_1} fN_S dxdy+\iint\limits_{e_2} fN_S dxdy+\cdots+\iint\limits_{e_l} fN_S dxdy$$ 算得

下面我们讨论每一个单元Δe对方程的贡献情况。每一个单元应该对相应的三个方程有贡献。

$$\begin{pmatrix} k_{ii}^e & k_{ij}^e & k_{im}^e \\ k_{ji}^e & k_{jj}^e & k_{jm}^e \\ k_{mi}^e & k_{mj}^e & k_{mm}^e \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_i \\ u_j \\ u_m \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} g_i^e \\ g_j^e \\ g_m^e \end{pmatrix}$$

令

$$K^e=\begin{pmatrix} k_{ii}^e & k_{ij}^e & k_{im}^e \\ k_{ji}^e & k_{jj}^e & k_{jm}^e \\ k_{mi}^e & k_{mj}^e & k_{mm}^e \end{pmatrix} \tag{6.20}$$

叫做单元刚度矩阵，其中每一个k_{is}^e计算格式是

$$k_{is}^e=\frac{1}{4\Delta e^2}\iint\limits_{\Delta e}(b_i b_S+c_i c_S)dxdy$$

$$=\frac{1}{4\Delta e}(b_i b_S+c_i c_S) \tag{6.21}$$

其中Δe是单元e的面积，g_i^e的计算公式为

$$g_S^e=\iint\limits_{\Delta e} fN_S dxdy \tag{6.22}$$

把各单元刚度矩阵计算好以后，迭加起来即得到总刚度矩阵K，最后解方程组$KU=G$就可求得u_i。系数矩阵K是稀疏的，恰当的对顶点（如三角形）P_S编号，有可能使矩阵K成为带状或其它特殊形状，这样便于求解。而且这个矩阵K是对称正定的。

用下面例子说明用有限元方法计算u_i的过程。

设给定的区域Ω如图7.23所示。

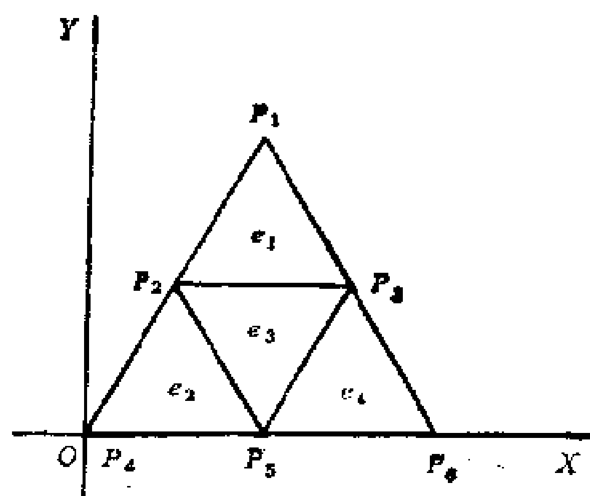


图 7.23

1　首先把Ω进行剖分e_1, e_2, e_3, e_4四个单元.

2　在每个小单元Δe上给出线性近似函数$u^e(x, y)$.

3　对每个小单元Δe 计算单元刚度矩阵 k^e

$$
e_1:\begin{pmatrix} k^{e_1}_{11} & k^{e_1}_{12} & k^{e_1}_{13} \\ k^{e_1}_{21} & k^{e_1}_{22} & k^{e_1}_{23} \\ k^{e_1}_{31} & k^{e_1}_{32} & k^{e_1}_{33} \end{pmatrix}\quad
e_2:\begin{pmatrix} k^{e_2}_{22} & k^{e_2}_{24} & k^{e_2}_{25} \\ k^{e_2}_{42} & k^{e_2}_{44} & k^{e_2}_{45} \\ k^{e_2}_{52} & k^{e_2}_{54} & k^{e_2}_{55} \end{pmatrix}
$$

$$
e_3:\begin{pmatrix} k^{e_3}_{22} & k^{e_3}_{25} & k^{e_3}_{23} \\ k^{e_3}_{52} & k^{e_3}_{55} & k^{e_3}_{53} \\ k^{e_3}_{32} & k^{e_3}_{35} & k^{e_3}_{33} \end{pmatrix}\quad
e_4:\begin{pmatrix} k^{e_4}_{33} & k^{e_4}_{35} & k^{e_4}_{36} \\ k^{e_4}_{53} & k^{e_4}_{55} & k^{e_4}_{56} \\ k^{e_4}_{63} & k^{e_4}_{65} & k^{e_4}_{66} \end{pmatrix}
$$

4　把所求得的单元刚度矩阵k^e迭加起来，
就可得到总刚度矩阵

$$
K=\begin{pmatrix}
k^{e_1}_{11} & k^{e_1}_{12} & k^{e_1}_{13} & k^{e_2}_{24} & 0 & 0 \\
k^{e_1}_{21} & k^{e_1}_{22}+{}^{e_2}_{22}+k^{e_3}_{22} & k^{e_1}_{23}+k^{e_3}_{23} & 0 & 0 & 0 \\
k^{e_1}_{31} & k^{e_1}_{32}+{}^{e_3}_{32} & k^{e_1}_{33}+k^{e_3}_{33}+{}^{e_4}_{33} & 0 & 0 & 0 \\
0 & k^{e_2}_{42} & 0 & k^{e_2}_{44} & k^{e_2}_{45} & 0 \\
0 & k^{e_2}_{52}+k^{e_3}_{52} & k^{e_3}_{53}+k^{e_4}_{53} & k^{e_2}_{54} & k^{e_2}_{55}+k^{e_3}_{55}+k^{e_4}_{55} & k^{e_4}_{56} \\
0 & 0 & k^{e_4}_{63} & 0 & k^{e_4}_{65} & k^{e_4}_{66}
\end{pmatrix}
$$

5　右端项G的计算

$$g_1 = g_1^{e_1} = \iint_{e_1} fN_1 dxdy$$

$$g_2 = g_2^{e_1} + g_2^{e_2} + g_2^{e_3} = \iint_{e_1} fN_2 dxdy + \iint_{e_2} fN_2 dxdy + \iint_{e_3} fN_2 dxdy$$

$$g_3 = g_3^{e_1} + g_3^{e_3} + g_3^{e_4} = \iint_{e_1} fN_3 dxdy + \iint_{e_3} fN_3 dxdy + \iint_{e_4} fN_3 dxdy$$

$$g_4 = g_4^{e_2} = \iint_{e_2} fN_4 dxdy$$

$$g_5 = g_5^{e_2} + g_5^{e_3} + g_5^{e_4} = \iint_{e_2} fN_5 dxdy + \iint_{e_3} fN_5 dxdy + \iint_{e_4} fN_5 dxdy$$

$$g_6 = g_6^{e_4} = \iint_{e_4} fN_6 dxdy.$$

6　对强加边界条件处理后得方程

$$\begin{pmatrix} k_{11}^{e_1} & k_{12}^{e_1} & k_{13}^{e_1} & 0 & 0 & 0 \\ k_{21}^{e_1} & k_{22}^{e_1} + k_{22}^{e_2} + k_{22}^{e_3} & k_{23}^{e_1} + k_{23}^{e_3} & 0 & 0 & 0 \\ k_{31}^{e_1} & k_{32}^{e_1} + k_{32}^{e_3} & k_{33}^{e_1} + k_{33}^{e_3} + k_{33}^{e_4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \\ u_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_1^{e_1} \\ g_2^{e_1} + g_2^{e_2} + g_3^{e_3} \\ g_3^{e_1} + g_3^{e_3} + g_3^{e_4} \\ u_4^0 \\ u_5^0 \\ u_6^0 \end{pmatrix}$$

其中

u_4^0, u_5^0, u_8^0为给定的边界值或强加边界条件处理后的结果。若不能得到确定的值时，那么就根据强加边界条件在边界点上列出方程。

7　解上面方程组，就可以求得u_i，关于k_{is}^{i}计算由公式(6.21)，当坐标给定以后，就可算出相应的b_i，b_s和c_i，c_s的值，然后再计算k_{is}^{i}的值。

习　　题　7.6

1　用有限元方法解方程

$$\begin{cases} -u''(x)=1, & 0<x<1 \\ u(0)=u(1)=0 \end{cases}$$

精确到10^{-3}，$(n=10)$。

第二部分　计算方法学习指导

第一章　误差学习指导

一　主 要 内 容

本章主要是论述误差的概念及其简单理论，其中包括：

1　误差的来源，其中重点是对截断误差和舍入误差的研究。

2　近似数的误差，即精确度的三种表示法，以及它们之间的相互关系。其中最为常用的是关于有效数字的概念。

3　误差的传播，即初始数据的误差，对运算结果的影响。这部分内容，对数值解法尤为重要。

二　基 本 要 求

1　误差是用来衡量数值方法好与坏的重要标志，为此对每一个方法都要注意误差分析，并要结合自己的实际工作加深理解误差概念和理论的实际意义。

2　要在弄清楚最基本的概念，及其它们之间的内在联系基础上，会处理最常见的一般运算结果和解决某些实际的问题。

3　在学习时，最好结合中学教材中的有关内容，研究引进近似数后出现的一些新问题。本书中的习题尽量多作些，它会帮助我们加深对某些概念和理论的理解和掌握。

三 内容分析

§1 引　　言

在这一节里简要地论述了学习误差理论的重要性及必要性。因为在科学实验和日常生活中，我们迂到的数绝大部分是近似数，因为它是通过带有刻度的度量工具获得的。精确数为数不多。如果引进近似数，完全能按着准确数的办法来对待，这也不会引起人们的重视，实际上出现了一些新问题，比如：

$$(\sqrt{2}-1)^6=[(\sqrt{2}-1)^3]^2=99-70\sqrt{2}$$

当用$\sqrt{2}\doteq 1.4$ 代入上式后确出现了$0.004096=1$的结果。这是怎么回事呢？还有没有其他结果？那一个是正确的呢？这是少量运算，大量运算又会怎样呢？这就是要研究误差的必要性，当然这部分内容研究起来很繁杂，有些办法还很粗糙，但我们一定要把基本概念掌握好。

§2 误差的来源

本节介绍的误差来源，并不是所有误差来源的概括，而是主要来源，我们常遇到的是舍入误差和截断误差。

在四舍五入法中，应当注意所谓偶数法则，是指当舍去部份的数字是5，而后面全为零时，则由保留部分的末位数字的奇偶性来定，偶则舍，奇则入。如

$A=42.3500=42.4$

$B=42.2500=42.2$

实践证明，这样处理在大量运算中误差积累较小。

§3 近似数的误差表示法

1 绝对误差

（1）绝对误差就是准确数与其近似数之差．并不含绝对值的意思．有人把它理解为绝对值是不对的．但绝对误差，这一定义在实际中并不适用，其原因是在一般情况下某量的准确值x^*是未知的，从而e_x值就无法求出，于是必须给出绝对误差界的定义，即

$$|e_x| = |x^* - x| \leqslant \Delta x \tag{3.1}$$

（2）在建立绝对误差界时，必须明确三点要求：

1° $|e_x| \leqslant \Delta x$，即$-\Delta x \leqslant e_x \leqslant \Delta x$．

2° Δx要尽可能的小．这是因为一个数$|e_x|$的上界有无限多，误差的位数也可能是很多的，若随便取一个上界可能失去实际意义，所以在书中用收尾法取一两个非零数字即可．如用四舍五入法截得的近似数不超过末位数所在位的半个单位，即

$$\Delta x \leqslant \frac{1}{2} 10^{n}$$

3° Δx 为比较好的能够求得出的数值．一般来讲，绝对误差界都取到某位的半个单位．

例 求$\sqrt{3}$的近似数，使其绝对误差界精确到 $\frac{1}{2}10^{-1}$，$\frac{1}{2}10^{-2}$，10^{-3}．

解 因为$\sqrt{3} = 1.73205\cdots$．由于

$$\Delta 1.7 = |\sqrt{3} - 1.7| = 0.03205\cdots < 0.05$$

$$\Delta 1.73 = |\sqrt{3} - 1.73| = 0.00205\cdots < 0.005$$

$$\Delta 1.732 = |\sqrt{3} - 1.732| = 0.00005\cdots < 0.0001$$

所以 $x_1 = 1.7$，$x_2 = 1.73$，$x_3 = 1.732$．

2 相对误差

相对误差为 $\varepsilon_x = e_x / x$，它表示单位量中含有的误差．作

为实用的相对误差界计算公式，取

$$\delta x = \frac{\Delta x}{|x|} \tag{3.4}$$

例　测量一木板长是954米，问测量的相对误差是多大？

解　因为实际问题所截取的近似数，绝对误差界一般不超过最小刻度的半个单位，所以此时当$x=954$米时，有$\Delta x=0.5$米，其相对误差界为：

$$\delta 954 = \frac{0.5}{954} = 0.0005241\cdots < 0.000525$$

$$= 0.0525\% < 0.053\%$$

我们要问，为什么最后取$\delta x=0.053\%$作为相对误差界而不取$\delta x=0.0525\%$，也不取$\delta x=0.052\%$作为相对误差界呢？这是因为绝对误差界0.5本身就是近似的数，所以商多取位数是无意义的。

即写出过多的非零数字是徒劳的；不取$\delta x=0.052\%$是因为要上界，其估值只能增不可减。

3　有效数字

（1）有效数字是表示近似数准确度的另一重要方法。它是由组成近似数的数字个数来表示近似数的精确度的。

在学习有效数字时，一定要去深刻的理解定义3．其中p，n都是正整数，m为整数，称为x的阶。m的值是确定近似数x的第一位非零数字x_1所在的数位。它们有一个明显的关系如下：

m	…	3	2	1	0	－1	－2	…
x_1所在数位	…	千位	百位	十位	个位	十分位	百分位	…

而p值是确定有效数字（位）的个数。

如　$\pi=3.1415926\cdots$，取$x=3.142$，则

$$\Delta 3.142 = |\pi - x| = |-0.000407\cdots| < 0.0005$$

所以

$$\Delta 3.142<\frac{1}{2}10^{-3}$$

此处$m=0$，$m-p+1=-3$，所以 $p=4$，即

$x=3.142$中的3、1、4、2四个数字都有效，即有效到千分位，3.142 是有效数。

（2）有效数字的另一种说法是：

一个近似数的绝对误差界不超过某末位的半个单位，则从它的左侧第一个非0数字起到末位止的所有数字都叫有效数字．这样从计算 Δx 中直接可以判定有效数字．如上例计算 $\Delta 3.142=\frac{1}{2}10^{-3}$，所以有4个有效数字．

（3）在上例中，若取$\pi\doteq 3.141$，则

$$\frac{1}{2}10^{-3}<|\pi-3.141|=|0.0005926\cdots|$$

$$<0.6\times10^{-3}\quad<0.5\times10^{-2}$$

所以近似数的绝对误差界不小于$\frac{1}{2}10^{-3}$，即近似数不能有效到千分位，$a=3.141$中千分位的1不是有效数字．

（4）本书中不标明绝对误差界或相对误差界的近似数都是有效的．所以在近似数中的小数末尾的零就不能随便添加或划掉，它们反应了近似数的精确度．

如　2.4，$\Delta 2.4=\frac{1}{2}\times10^{-1}$，　2个有效数字．

2.40，$\Delta 2.40=\frac{1}{2}\times10^{-2}$，3个有效数字．

0.24，$\Delta 0.24=\frac{1}{2}\times10^{-2}$，2个有效数字．

2.04，$\Delta 2.04=\frac{1}{2}\times10^{-2}$，3个有效数字．

要将1.5吨用公斤表示，只能写成 1.5×10^{3} 公斤，而不能写成1500公斤．

4　有效数字的个数与相对误差界

（1）对于一个近似数的表示方式，我们已有三种，绝对误差（Δa）；相对误差 $\delta a=\frac{\Delta a}{a}$；有效数字个数（$p$），即

$\Delta x \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-p}$. 这三种表示法是相互等价的。

（2）定理的证明用到了下面的知识：

1° 有效数字的定义

$$\Delta x \leqslant \frac{1}{2} 10^{m-p+1}$$

应理解为

$$10^{m-p} < \Delta x \leqslant \frac{1}{2} 10^{m-p+1}$$

否则与定义就不相符了。

2° 若

$$x = x_1 \cdot 10^m + x_2 \cdot 10^{m-1} + \cdots, \quad x_1 \neq 0$$

则有

$$x_1 \cdot 10^m \leqslant x \leqslant (x_1 + 1) \cdot 10^m$$

（3）1° 在一组近似数中，一般说来含有有效数字愈多的近似数，它的相对误差就愈小，即 x 愈准确.

2° 在一组近似数中，若有效数位相同时，则其中第一个有效数字x_1愈大，则其相对误差界愈小，即近似数愈精确。

3° 作为定理的应用，在此我们举两个例子：

例 1 已知近似数 a 有两位有效数字，试求其相对误差界。

解 此题给出的已知条件是：$p=2$，但并没给出近似数 a 的第一位有效数字 x_1，遇到这种情况时，我们可按第一位有效数字出现的最不利的情况估计，即令 $x_1=1$，则由公式

$$\delta a \leqslant \frac{1}{2 \cdot x_1 \cdot 10^{p-1}} = \frac{1}{2 \times 1 \times 10^{2-1}} = 5\%$$

故 a 的相对误差界为 5%。

例 2 已知近似数 a 的相对误差界为 0.3%，问 a 至少有几位有效数字？

解 已知 $\delta_a = 0.3\%$，设 a 有 p 个有效数字，但由于 a 的第一个有效数x_1没具体给定，而我们知道 x_1一定是1,2，…，9 中的一个，由于

$$\delta a = 0.3\% = \frac{3}{1000} < \frac{1}{2\times 10^2} = \frac{1}{2(9+1)} \times 10^{-1}$$

由公式（3、8），令$p-1=1$，则 $p=2$。因此由定理 2 知 a 至少有 2 个有效数字。

（4）可靠数字的定义可用文字叙述如下：

一个近似数，其绝对误差界不超过其末位的一个单位的近似数，称为可靠数，从其左边第一个不为 0 的数字起到末位止的所有数字为可靠数字。

注意可靠数字与有效数字的区别：即是把近似数 x 的绝对误差界放宽到

$$\Delta x \leqslant 10^{m-p+1}$$

而得到可靠数位的近似数。

§4 误差的传播

1 函数值的误差

我们对 K 个数进行运算，实际上就等于已知一个式子及自变量的值，而求函数值。例如计算

$$f = \frac{2.50+3.27}{7.86} \times 5.89 - \sqrt{10.9}$$

就相当于已知

$$f(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5) = \frac{(x_1+x_2)x_3}{x_4} - x_5$$

计算

$$f(2.50,\ 3.27,\ 5.89,\ 7.86,\ 10.9)$$

所以估计运算结果的误差，就是估计函数的误差，这也是大家熟悉的全微分在近似计算上的应用。另一方面也确实存在需要估计函数值的误差的问题。因此函数的误差是本节的基本的一般性理论。

条件数的大小，标志着在一点 A 的函数值 $f(A)$ 的可靠程

度，那么它们的值究竟多大才算好与坏呢？这完全随解题的要求而定．为了明确起见，我们在此举两个例子．

例 1　当 x 在 0 点附近，而 n 很大时，计算函数

$$f(x)=\frac{1}{n}\sin(n^3x)$$

解　由于

$$f'(x)=n^2\cos(n^3x)$$

在 $x\doteq0$ 处，当 n 很大时，$|f'(x)|$ 也很大，所以是坏条件的。

例 2　试确定函数 $f(x)=\ln x$，在相对误差意义下，$\ln x$ 在 $x\doteq1$ 时的条件好坏？

解　由于

$$\frac{xf'(x)}{f(x)}=\frac{1}{\ln x}$$

所以当 x 很接近 1 时计算是坏条件的，即在 $x\doteq1$ 时，计算 $f(x)=\ln x$，其误差会很大。如

$$x=1.01(\pm0.5\times10^{-2})$$

$$\delta x=\frac{0.5\times10^{-2}}{1.01}=0.495\times10^{-2}$$

则

$$\delta f(x)<\frac{1}{\ln1.01}\times0.5\times10^{-2}\doteq1.005$$

误差很大．

实际上直接计算 $\ln1.01\doteq0.009950$

用 $\ln\frac{1+x}{1-x}$ 的台劳展开计算 $\ln1.01=0.004975$，后者可靠。

2　代数运算结果的误差

这段的内容是前段函数误差的具体应用，而且是主要的应用．因为代数运算是经常要大量进行的．至于一些初等函数的误差估计留给读者自己作．

（1）应用（4.2）式，给出了加法、减法、乘法、除法及开方运算结果的误差估计公式，这里特别要注意两数相近进行减法运算时有效数字会严重损失，遇到这种情况应采取两种办法，第一应多保留几位有效数字，其二将算式恒等变形，然后再进行计算。

例1　当 x 接近于0时，计算

$$\frac{1-\cos x}{\sin x}$$

解　此时应当把算式变形为

$$\frac{1-\cos x}{\sin x}=\frac{1-\cos^2 x}{\sin x(1+\cos x)}=\frac{\sin x}{1+\cos x}$$

再计算。

例2　当 x 充分大时，计算

$$\sqrt{1+x}-\sqrt{x}$$

解　应把算式变形为

$$\sqrt{1+x}-\sqrt{x}=\frac{1}{\sqrt{1+x}+\sqrt{x}}$$

其他还有很多情况，只要在实际计算时注意到就可以了。

（2）　平方根的误差估计及法则是应用（4.2），得到

$$\varepsilon_f=\frac{1}{2}\varepsilon_a, \qquad (4.7)$$

它说明平方根的相对误差界等于被开方数相对误差界的一半。

同样，a 的 k 次方根的相对误差界，等于 a 的相对误差界的 $\frac{1}{k}$，即

$$\delta\sqrt[k]{a}=\frac{1}{k}\delta a$$

从上式看出，当取定了数 a，k 越大，$\delta\sqrt[k]{a}$ 就越小，这说明方根的精度高于被开方数的精度。

（3）在这里我们再说明一下关于对数的误差估计式，当

$f(x)=\lg x$，$x>0$，$x\doteq a$时，由（4.1）得：

$$\Delta f=\frac{M}{a}\Delta a=M\delta a<\frac{1}{2}\delta a$$

其中 $M=0.43428\cdots(\lg e=M)$。

上式说明近似数 a 的常用对数的绝对误差界小于 a 的相对误差界的一半。当

$$\delta a<10^{-n}$$

时，则

$$\Delta f<\frac{1}{2}10^{-n}$$

它表明，当 a 有 n 个可靠数字时，其对数 $\lg a$ 精确到第 n 位小数（不应用补插的情况下），这个结论告诉我们，例如当 a 只有四位可靠数字时，就用四位对数表就足够了．用更多位对数表是徒劳的．例如，

$$\Delta\lg 5.43\doteq 0.43\times\frac{0.005}{5.43}<\frac{1}{2}\times 10^{-3}$$

$$\Delta\lg 0.8043\doteq 0.43\times\frac{0.00005}{0.8043}<\frac{1}{2}10^{-4}$$

若用（4.2）又可推出

$$\varepsilon_f=\frac{M}{\lg a}\varepsilon_a$$

即常用对数的条件数等于

$$\left|\frac{M}{\ln a}\right|\doteq\frac{1}{2|\lg a|}$$

只有当 $a\geqslant 3.2$时，有$2|\ln a|>1$，则条件数<1。

3　数值稳定性

一个工程的计算问题，其数值运算往往有成千上万次运算，计算的每一步都可能发生误差，所以对一个计算工作者必须会运用几种不同算法的比较来确定计算结果的可靠性。学习这一段要好好理解数值稳定性的意义，应结合本书中的例子加深理解。

例　解线性方程组

$$\begin{cases} 0.03x_1 + 3x_2 = 2.01 & (1) \\ x_1 + x_2 = 1 & (2) \end{cases}$$

解　方法Ⅰ：用消元法解，由（1）÷0.03得与之同解方程组

$$\begin{cases} x_1 + 100x_2 = 67 & (3) \\ x_1 + x_2 = 1 & (4) \end{cases}$$

消去（4）中元素x_1得

$$x_2 = \frac{66}{99} \doteq 0.67$$

代入（3）中得

$$x_1 = 0$$

方法Ⅱ：先将（2），（1）交换，然后用消元法解，即

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 1 & (5) \\ 0.03x_1 + 3x_2 = 2.01 & (6) \end{cases}$$

消去（6）中元素x_1，即

$$(5) \times (-0.03) + (6)$$

得

$$2.97x_2 = 1.98$$

$$x_2 = \frac{1.98}{2.97} \doteq 0.67$$

代入（5）中得　$x_1 = 0.33$.

上述两种方法，只交换两方程次序，解得x_1确不一样。

此方程组的精确解为

$$x_1 = \frac{1}{3}, \quad x_2 = \frac{2}{3}$$

显然方法Ⅱ比较好。

当方程组阶数高运算次数增加时，有时会更明显，所以在今后应注意选择稳定的算法是十分重要的。

四 复习思考题

1 (1) 指出0.34，3.4，3.40 的绝对误差界。

(2) 取$\sqrt{2}$的具有3个有效数字的近似数。

(3) 将4.5吨用以公斤为单位表示。

2 试述表示近似数误差的三种方法，并指出其之间关系。

3 已知$\lg a=\bar{1}.1745(\pm 2\times 10^{-4})$，问$a$的绝对误差界是多少？

4 证明$\delta(a_1+a_2+\cdots+a_n)\leqslant$

$\leqslant\max\{\delta a_1,\ \delta a_2,\ \cdots,\ \delta a_n\}$，$a_i>0$，$i=1,2,3\cdots,n$。

5 如何计算$(2-\sqrt{3})^6$使结果比较精确。

五 本章小结

1 误差来源

数学模型误差；观测误差；截断误差；舍入误差。

2 近似数的误差表示法

绝对误差及其界

$$|e_x|=|x^*-x|\leqslant\Delta x$$

相对误差及其界

$$\beta_x=\frac{x^*-x}{x^*}\leqslant\frac{\Delta x}{|x|}=\delta x,\ x\neq 0,\ x^*\neq 0$$

有效数字与可靠数字

$\Delta x\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{m-p+1}$时，$x$是具有$p$个有效数位的近似数。

$\Delta x\leqslant 10^{m-p+1}$时，$x$是具有$p$个可靠数字的近似数。

3 函数值的误差（在点A处）

绝对误差

$$e_f = df = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\right)_A a_1 + \left(\frac{\partial f}{\partial x_2}\right)_A a_2 + \cdots + \left(\frac{\partial f}{\partial x_n}\right)_A a_n$$

相对误差

$$\varepsilon_f = \frac{e_f}{f(A)} = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)_A \frac{a_i}{f(A)} \varepsilon_{a_i}$$

其中 $\left|\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)\right|_A$ 为在绝对误差意义下，f 在 A 处的条件数；$\left|\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)\right|_A \left|\frac{a_i}{f(A)}\right|$ 为在相对误差意义下，f 在点 A 处的条件数。

4　代数运算结果的误差（在点 A 处）

和：设 $f(x_1, x_2) = x_1 + x_2$，则

$$\varepsilon_f = \frac{a_1}{a_1 + a_2} \varepsilon_{a_1} + \frac{a_2}{a_1 + a_2} \varepsilon_{a_2}$$

差：设 $f(x_1, x_2) = x_1 - x_2$，则

$$\varepsilon_f = \frac{a_1}{a_1 - a_2} \varepsilon_{a_1} - \frac{a_1}{a_1 - a_2} \varepsilon_{a_2}$$

积：设 $f(x_1, x_2) = x_1 \cdot x_2$，则

$$\varepsilon_f = \varepsilon_{a_1} + \varepsilon_{a_1}$$

商：设 $f(x_1, x_2) = x_1 / x_2$，则

$$\varepsilon_f = \varepsilon_{a_1} - \varepsilon_{a_1}$$

乘方：设 $f(x) = x^k$，则

$$\varepsilon_f = k\delta a$$

开平方：设 $f(x_1) = \sqrt{x_1}$，则

$$\varepsilon_f = \frac{1}{2} \varepsilon_{a_1}$$

5　误差的传播

原始数据的误差对计算结果的误差影响，称为**误差的传播**。

计算结果受误差传播影响较小的数值解法，即误差传播是可控的，称之为数值稳定的，否则是数值不稳定的。

第二章　代数（或超越）方程的数值解法学习指导

一　主要内容

本章讨论单个函数方程

$$f(x)=0$$

的求根方法.

在方程 $f(x)=0$中，若函数 $f(x)$为多项式，则称为代数方程；若函数$f(x)$为超越函数，则称为超越方程.

我们已经知道，对于低次（一、二次）代数方程可通过公式法求根，对于特殊的高次代数方程可用因式分解法求根，而对于特殊的超越方程（如某些三角方程）也可通过特殊方法求根. 但对于生产实际和科学技术中经常遇到的一般代数（超越）方程，用已有方法就无法解决了.

本章就是讨论求一般代数（超越）方程根的数值方法. 这些方法都属于近似方法，即通过有限步运算可求出满足一定精度要求的近似根.

由篇幅所限，本章只给出了最基本的五个求根方法：区间二分法，弦截法，切线法（牛顿法），一般迭代法，劈因子法. 有些其它方法（如平行弦法，简化牛顿法，切比雪夫法等）在习题中给出.

二　基本要求

（一）掌握用迭代法（逐次逼近法）求方程近似根的思

想：

首先确定所要求根x^*的所在区间，确定初始近似根x_0，然后按某种方法把x_0逐步精确化，直到满足所要求精度为止。

（二）对每一种方法应掌握其基本思想(包括几何意义)，迭代公式，使用（收敛）条件，以及与其它方法的异同。

（三）能正确运用所学方法求给定方程满足一定精度要求的某些近似根。

三 内容分析

§1 引 言

1 学习代数（超越）方程数值解法的意义在于：

（1）对于生产实践和科学研究中经常提出的一般代数（超越）方程，例如：

$$x^5-2x-5=0$$

$$x-\mathrm{tg}x=0$$

已有的精确求根方法就无法解决了。

（2）所谓精确求根法，其实也并不精确，由于原始数据误差和计算过程中舍入误差的影响，结果往往也只能得到其近似根。

（3）实际问题要求也只是满足一定精确度的近似根。

2 代数（超越）方程数值解法的基本思想是：

首先确定方程

$$f(x)=0 \tag{1.1}$$

所要求根x^*所在区间$[a,b]$及初始近似根x_0，然后再把x_0逐步精确化，也就是由x_0继续求出x_1，x_2，…，使得它们与x^*越来越接近．直到满足所要求精度为止。

3 确定x^*所在区间$[a,b]$和初始近似根x_0的几种常用方

法：

（1）画图法

例如确定方程

$$x - tgx = 0$$

的最小正根所在区间和初始近似。

我们可以分别作出$y=x$和$y=tgx$的图形，找出第一个x为正值的交点A，然后在x轴上确定出含有A点横坐标的区间$[a, b]$，如图2.1 所示：

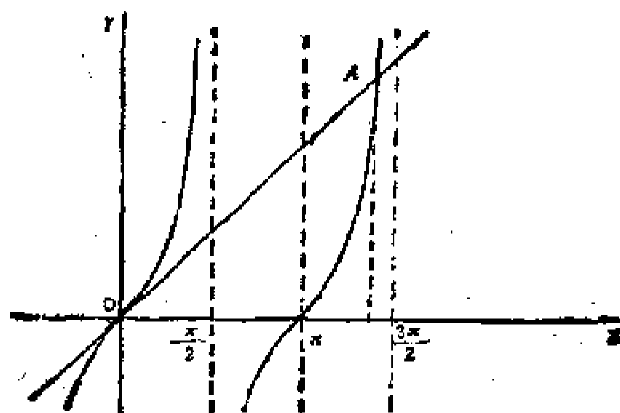


图 2.1

此区间大些或小些都可以，若怕不把握还可以通过计算$f(a)$，$f(b)$进行检验。

本问题由图2.1 可得：$x^* \in \left[\frac{5\pi}{4}, \frac{3\pi}{2}\right]$初始近似根$x_0$可根据要求在此区间内选取。

（2）代替法

用原方程$f(x)=0$的简单近似函数$\varphi(x)$代替$f(x)$，而

$$\varphi(x) = 0 \qquad (1.2)$$

容易求根，于是用(1.2) 的根$\tilde{x}$作为初始近似根x_0，再确定含有x_0的区间$[a, b]$。

例如，求方程

$$x - \cos x = 0$$

最小正根所在区间和初始近似。因为

$$f(x)=x-\cos x=x-\left(1-\frac{x^2}{2}+\frac{x^4}{4}-\cdots\right)$$

故可取

$$\varphi(x)=x-1+\frac{x^2}{2}$$

代替函数$f(x)$。再由

$$\varphi(1)=\frac{1}{2}>0, \quad \varphi\left(\frac{1}{2}\right)=-\frac{3}{8}<0$$

可取 $[a, b]=\left[\frac{1}{2}, 1\right]$

x_0可根据要求在$\left[\frac{1}{2}, 1\right]$内选取。

（3）隔离法

根据$f(x)$连续单调，如果 $f(a)f(b)<0$，则

$$f(x)=0$$

在$[a, b]$内只有一个根的道理，通过计算一些点的函数值，找出含根区间$[a, b]$来。

例如，求方程

$$x^3+3x-1=0$$

的最小正根所在区间和初始近似。

我们列表计算：

x	0	1	2	3
$f(x)$	-1	3	13	35

所以$x^*\in[0, 1]$，x_0可根据要求在$[0, 1]$内选取。

4　秦九韶除法

在代数方程的数值解法中，经常需要计算多项式$f(x)$在某x_0点的值，下面介绍简便易行的秦九韶除法。设

$$f(x)=x^n+a_1x^{n-1}+\cdots+a_n$$

用 $x-x_0$除 $f(x)$得：

$$f(x)=(x-x_0)Q(x)+r \tag{1.3}$$

其中 $Q(x)=x^{n-1}+b_1x^{n-2}+\cdots+b_{n-1}$，比较（1.3）两端同次幂系数得：

$$b_k=a_k+x_0b_{k-1},\quad k=1,2,\cdots,n$$

$$b_n=r=f(x_0)$$

计算 $f(x_0)=r$ 的秦九韶程序如下表：

	1	a_1	a_2	……	a_{n-1}	a_n
x_0		x_0	x_0b_1	……	x_0b_{n-2}	x_0b_{n-1}
	1	b_1	b_2	……	b_{n-1}	$b_n=f(x_0)$

此计算程序也可写作：

$$f(x_0)=(\cdots((((x_0+a_1)x_0+a_2)x_0+a_3)x_0 +a_4)x_0+\cdots+a_{n-1})x_0+a_n \tag{1.4}$$

例如，求多项式

$$f(x)=x^4-2x^3-4x^2+x+4$$

在$x=3$点值。

由程序（1.4）得：

$$\begin{aligned}f(3)&=(((3-2)\times3-4)\times3+1)\times3+4\\&=((3-4)\times3+1)\times3+4\\&=-2\end{aligned}$$

§2 区间二分法

1　区间二分法的思想非常简单，即逐次二等分含有根x^*的区间，然后通过比较分点的函数值和两个端点函数值的符号，确定出更小的含有根x^*的区间。

2　在区间二分法的计算过程中，每计算一次分点的函数值 $f(x_k)$的符号，只能出现三种情况（$f(x_k)=0$，$f(x_k)>0$，

$f(x_k)<0$) 之一，这从书本的例子中可明显看出。

3　区间二分法的优点是：计算程序简单，对函数$f(x)$的要求比较低，只要求在$[a, b]$上连续。它的缺点是：收敛速度慢，只有相当于以$\frac{1}{2}$为公比的等比数列收敛于零的速度。

区间二分法常用来求较好的含根x^*的区间$[a, b]$和初始近似根x_0，以便使用其它高速度的求根方法。

例如，要使用双点弦法求方程

$$x^3+1.1x^2+0.9x-1.4=0$$

的最小正根。

首先确定含有最小正根的区间，在这个区间上还要满足双点弦法的收敛条件。

因为$f(0)=-1.4<0$，$f(1)=1.6>0$，所以$x^*\in[0, 1]$

但此区间不满足收敛条件$K\cdot R\leqslant\rho<1$。

这时我们可用区间二分法去确定满足双点弦法收敛条件的区间．由于

$$f(0.5)=-0.55<0$$

所以$x^*\in[0.5, 1]$，在此区间上有：

$$M_2=\max|f''(x)|=6+2.2=8.2$$

$$m_1=\min|f'(x)|=2.75,\quad R\leqslant 0.5$$

$$K\cdot R=\frac{M_2}{2m_1}R\leqslant\frac{4.4}{5.5}=\frac{4}{5}<1$$

故可取$[a, b]=[0.5, 1]$。

4　解题步骤

（1）确定所要求根x^*所在区间$[a, b]$．此区间只要含有唯一根x^*，而函数$f(x)$在这区间上连续即可．一般可取函数值反号的相邻整数区间。

（2）由误差估计式：

$$|x_n-x^*|\leqslant\frac{1}{2^n}(b-a)$$

计算出满足精度要求的x_n的最小n值。

如要求精确到10^{-m}，则由

$$|x_n - x^*| \leqslant \frac{1}{2^n}(b-a) \leqslant \frac{1}{2}\times 10^{-m}$$

解得

$$n \geqslant \frac{\lg(b-a)+m}{\lg 2}+1$$

可取

$$n_0 = \left[\frac{\lg(b-a)+m}{\lg 2}\right]+2$$

例如，要求根精确到 10^{-3}，$[a, b]=[1, 2]$，则取

$$n_0 = \left[\frac{3}{\lg 2}\right]+2 = 9+2 = 11$$

（3）按二分法计算程序计算，到x_{n_0}为止，取 $x^* \doteq x_{n_0}$。

§3 弦 截 法

1 使用单点弦法时，要特别注意定理1，定理2给出的两个迭代公式的使用（收敛）条件：

（1）当$f'(x)f''(x)>0$，即$f'(x)$和$f''(x)$在$[a, b]$上同号时（如图2.2所示），应取 b 为固定点，$x_0=a$，使用迭代公式：

$$x_{n+1} = x_n - \frac{b-x_n}{f(b)-f(x_n)}f(x_n),\quad n=0, 1, \cdots$$

（2）当$f'(x)f''(x)<0$，即$f'(x)$和$f''(x)$在$[a, b]$上反号时（如图2.3所示），应取 a 为固定点，$x_0=b$，使用迭代公式：

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n-a}{f(x_n)-f(a)}f(x_n),\quad n=0, 1, \cdots$$

只有这样，才能保证得到的序列$\{x_n\}$收敛于x^*。否则，就不能确保收敛。

在图2.4中表示在$[a, b]$上 $f'(x)>0$，$f''(x)>0$，但取 a 为固定点，$x_0=b$，使用迭代公式：

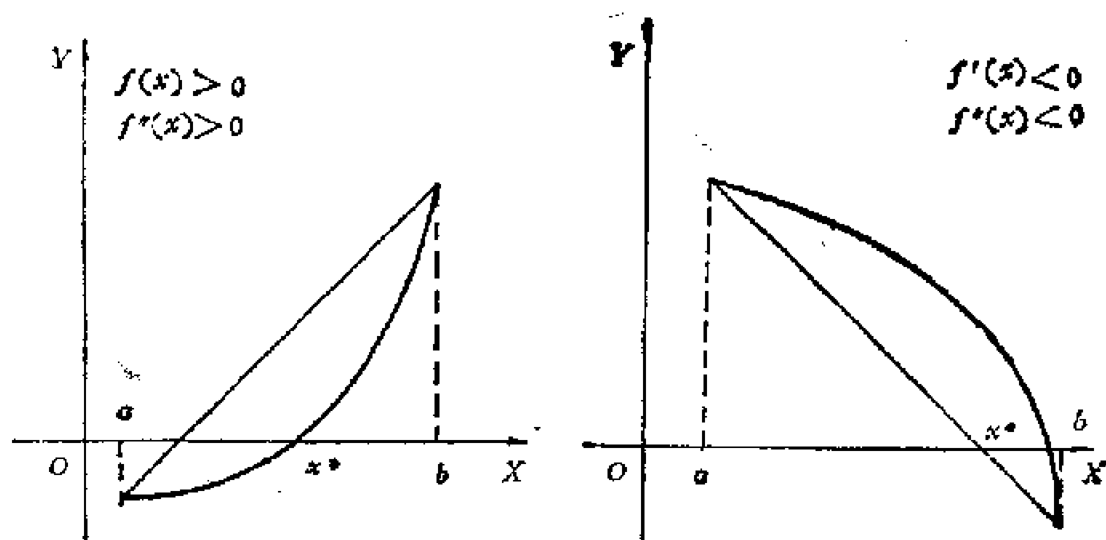


图 2.2

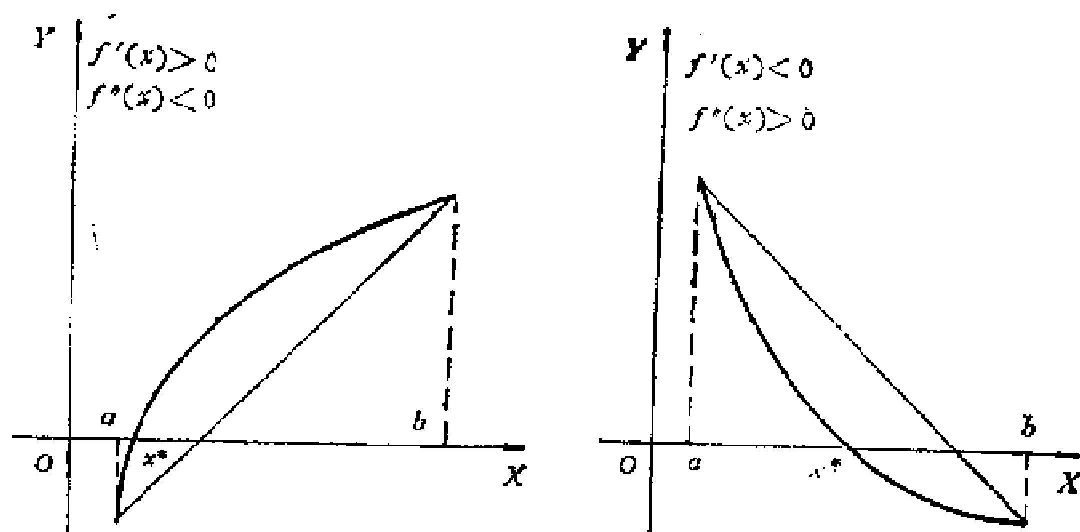


图 2.3

$$x_{n+1}=x_n-\frac{x_n-a}{f(x_n)-f(a)}f(x_n),\ n=0,\ 1,\ \cdots$$

则得到的序列$\{x_n\}$不收敛于x^*。

2　定理1，定理2中的三个条件都是单点弦法收敛的充分条件，而非必要条件。下面结合两个图形加以说明：

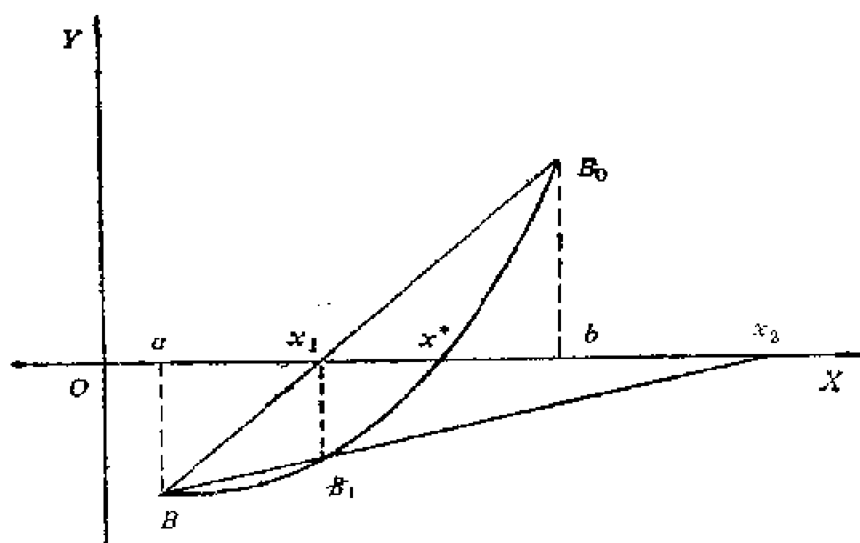


图 2.4

（1）图2.5表示 $f'(x)$，$f''(x)$在$[a, b]$上变号，但取$x_0=a$，b为固定点的单点弦法仍收敛。

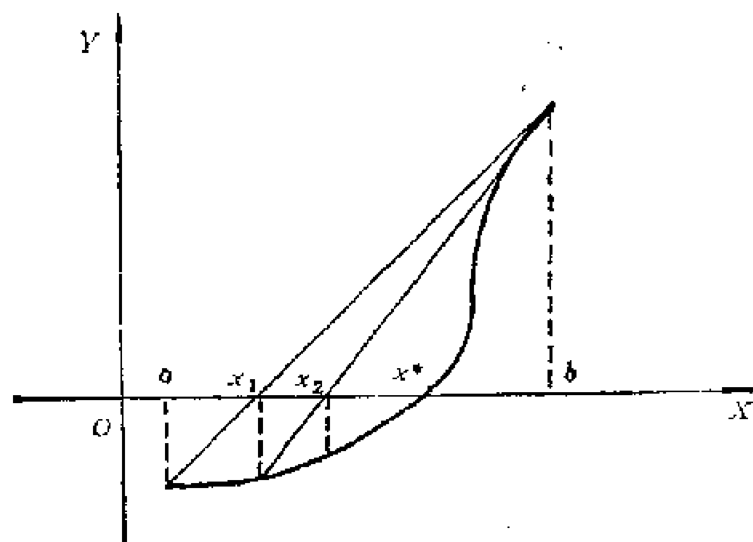


图 2.5

（2）图2.6表示在$[a, b]$上满足$f'(x)f''(x)>0$，但取a为固定点，$x_0=b$，使用迭代公式：

$$x_{n+1}=x_n-\frac{x_n-a}{f(x_n)-f(a)}f(x_n),\quad n=0,\ 1,\ \cdots$$

得到的序列$\{x_n\}$仍收敛于x^*，但这时收敛不是单调的。

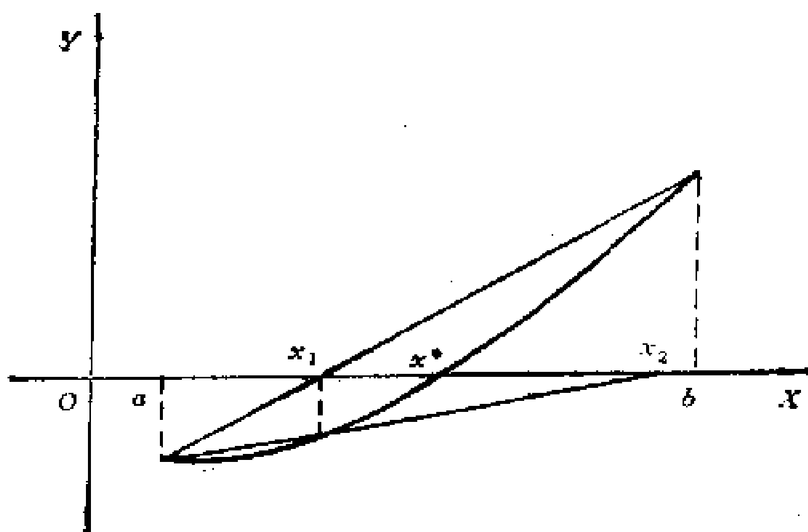


图 2.6

3　双点弦法定理3中的条件（3）：

$$K\cdot R\leqslant\rho<1$$

是局部性的充分条件。在很多问题中，若$[a,\ b]$取得较大，则此条件就不能得到满足，但有时方法仍然收敛。

例如，用双点弦法求方程

$$x^3+1.1x^2+0.9x-1.4=0$$

在$[0,\ 1]$内的根。由于

$$f(0)=-1.4<0,\quad f(1)=1.6>0$$

$$f'(x)=3x^2+2.2x+0.9>0,\quad f''(x)=6x+2.2>0$$

$$M_2=f''(1)=8.2,\quad m_1=f'(0)=0.9$$

$$K=\frac{M^2}{2m_1}\geqslant4.4,\quad R\geqslant\frac{1}{2}$$

所以有　$K\cdot R\geqslant2.2>1$。

但是双点弦法仍然收敛，计算结果如下：

$x_0=0$, $x_1=1$

$x_2=0.466667$, $x_3=0.618846$

$x_4=0.608775$, $x_5=0.670210$

$x_6=0.670653$, $x_7=0.670657$

$x_8=0.670657$

所以 $x^* \doteq 0.670657$

4 为了确保双点弦法收敛：

方法一是： 用区间二分法去寻找更小的有根区间，使得在这个区间上满足条件：

$$K \cdot R \leqslant \rho < 1$$

如在上例中，用区间二分法得到：

$x^* \in [0.5, 1]$，在$[0.5, 1]$上有

$$K \cdot R = \frac{M_2}{2m_1} \cdot R \leqslant \frac{8.2}{2 \times 2.75} \times \frac{1}{2} < 1$$

即在区间$[0.5, 1]$上双点弦法定收敛。

方法二是：应用定理4选区间$[a, b]$，使得$f(x)$在$[a, b]$上满足：

（1） $f(a)f(b)<0$

（2） $f'(x), f''(x)$连续，不变号，

（3） 选初值x_0, x_1，使得：

$$f(x_0)f''(x)>0, f(x_1)f''(x)>0$$

这样定能保证双点弦法得到的序列$\{x_n\}$单调收敛到x^*。

5 定理4收敛性的证明：

不失一般性，不妨设$f(a)<0, f(b)>0, f'(x)>0, f''(x)>0$, $f(x_0)>0$, $f(x_1)>0$, $x_0>x_1$，如图2.7所示。

由于

$$x_2 = x_1 - \frac{x_1 - x_0}{f(x_1) - f(x_0)} f(x_1)$$

$x_0>x_1$, $f'(x)>0$, $f(x_1)>0$

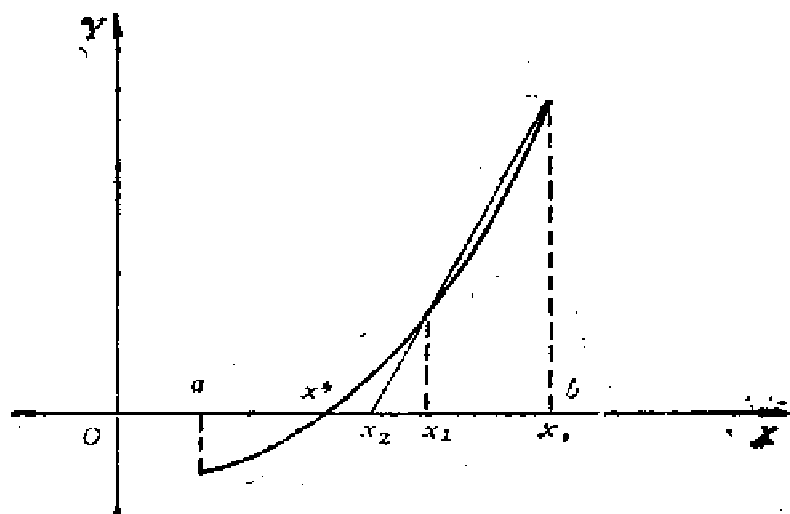


图 2.7

得

$$x_2 < x_1$$

又由定理 3 证明中（3.8）得：

$$x^* - x_2 = -\frac{f''(\xi_1)}{2f'(\eta_1)}(x^* - x_0)(x^* - x_1) < 0$$

$$x^* < x_2 < x_1 < x_0$$

完全同样可证明：

$$x^* < x_{n+1} < x_n < x_{n-1}$$

故得$\{x_n\}$为单调下降序列，且有下界x^*，必存在极根，设为$\overline{x}$。对于

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})} f(x_n)$$

两边取极限得：

$$\overline{x} = \overline{x} - \frac{f(\overline{x})}{f'(\overline{x})}$$

又由$f'(x) > 0$，得$f(\overline{x}) = 0$。

再由根的唯一性得：

$$x_n \to \overline{x} = x^* \quad (n \to \infty)$$

§4 切 线 法

1 在切线法收敛性定理中$f(x)$在$[a, b]$上应满足的前两个条件应理解为：

（1）$f(a)f(b)<0$，

此条件是保证$f(x)=0$在$[a, b]$内有根。

（2）$f'(x)$，$f''(x)$连续，不变号。

此条件是保证$f(x)$的单调性，凸凹性不变。

由条件（1），（2）则可得函数$f(x)$在$[a, b]$上的图形只能有如图2.8所示的四种情况。

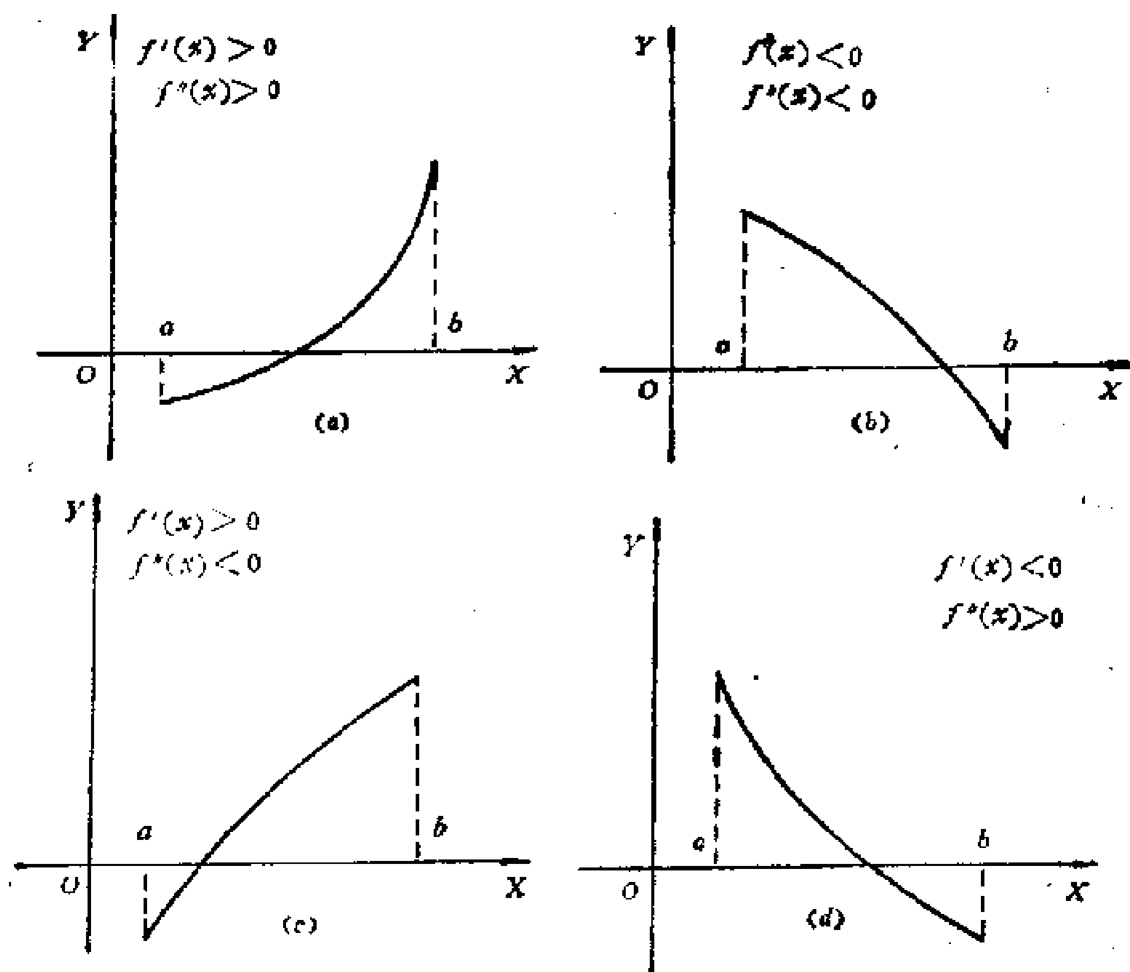


图 2.8

2　切线法收敛性定理中的第三个条件：

（3）$f(x_0)f''(x)>0$

是非常重要的，这是选取初始近似x_0应满足的条件。若x_0不满足此条件，则可能导致切线法不收敛，（见图2.9）。

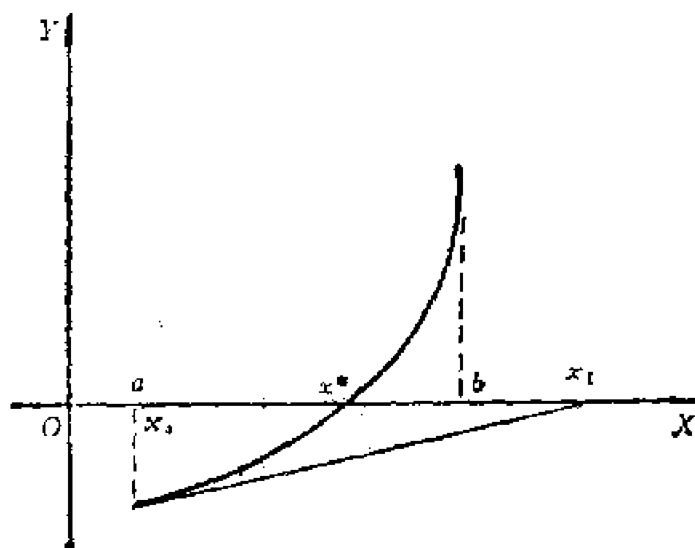


图　2.9

3　切线法收敛性定理中的三个条件都是充分条件，而非必要条件。

（1）图2.10表示$f'(x)$，$f''(x)$在$[a, b]$上变号，但切线

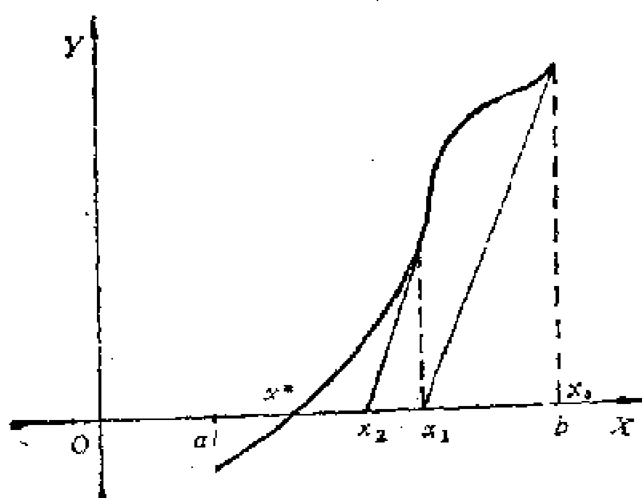


图　2.10

法仍然收敛。

（2）图2.11表示选取x_0，使得：

$$f(x_0)f''(x)<0$$

但切线法仍然收敛，只不过不为单调收敛。

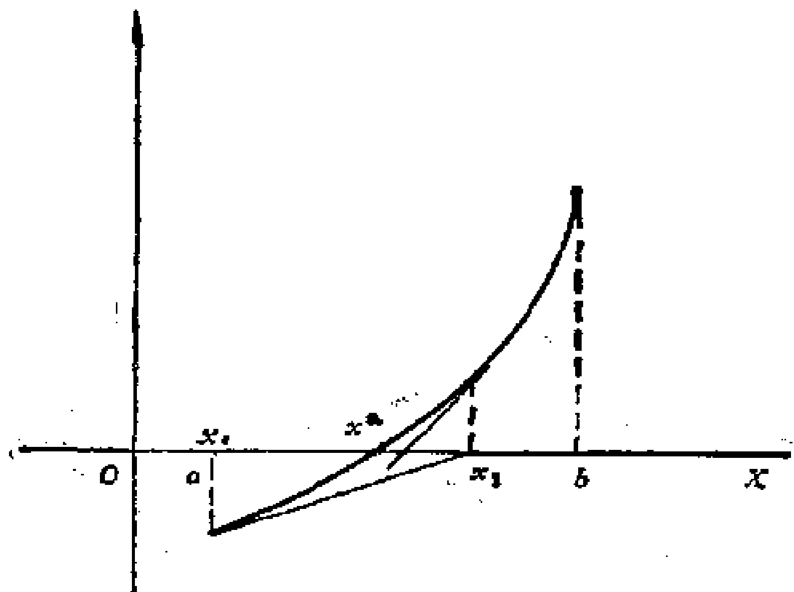


图 2.11

4　切线法收敛性定理证明是在假设：$f(a)<0$，$f(b)>0$，$f'(x)>0$，$f''(x)>0$ 情况下进行的（见图2.8(a)），其它三种情况（如图2.8(b)，(c)，(d)）证明完全可类似推导出。

下面看当 $f(a)<0$，$f(b)>0$，$f'(x)>0$，$f''(x)<0$，的情况（见图2.8(c)）。

这里与第二章中证明不同处仅在于：

首先证明$\{x_n\}$为单调增加有界序列，为此证明：

$$x_0<x_1<x^*$$

由于

$$x_1=x_0-\frac{f(x_0)}{f'(x_0)}>x_0$$

$$x^*-x_1=-\frac{f''(\xi_0)}{2f'(x_0)}(x^*-x_0)^2>0$$

所以有　$x_0<x_1<x^*$

5　解题步骤：

（1）确定含有唯一所求根x^*的区间$[a, b]$。

（2）检验$f'(x)$，$f''(x)$在$[a, b]$上是否满足连续，不变号。若不满足则可用二分法寻找更小的含根区间，使之满足$f'(x)$，$f''(x)$连续，不变号。

（3）根据条件$f(x_0)f''(x)>0$选择初始近似根x_0。

（4）应用牛顿迭代公式：

$$x_{n+1}=x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_n)},\ n=0,\ 1,\ \cdots$$

进行计算，直到满足精度要求为止。

§5　一般迭代法

1　一般迭代法迭代程序的形成，关键在于将方程

$$f(x)=0$$

在$[a, b]$上进行同解变形为

$$x=\varphi(x) \tag{5.1}$$

此同解变形是多种多样的。值得注意的是，在这些同解变形中有的满足收敛条件：

$$\rho=\max_{x\in[a, b]}|\varphi'(x)|<1 \tag{5.2}$$

有的则不满足。只有用满足（5.2）的变形（5.1）去形成迭代程序：

$$x_{n+1}=\varphi(x_n),\ n=0,\ 1,\ \cdots$$

才能确保 $x_n\to x^*$ $(n\to\infty)$。

2　经验表明采用同解变形：

$$x=x-\alpha f(x)\ （\alpha 为非0常数）$$

计算比较方便。

只要选取α与$f'(x)$同号，且

$$0<|\alpha|<\frac{2}{M_1}$$

其中 $M_1=\max\limits_{x\in[a,b]}|f'(x)|$，就能确保一般迭代法迭代程序：

$$x_{n+1}=x_n-\alpha f(x_n),\ n=0,\ 1,\ \cdots$$

产生的序列$\{x_n\}$收敛于x^*。

这是因为当α与$f'(x)$同号，且$0<|\alpha|<\frac{2}{M_1}$时，有

$$|\varphi'(x)|=|1-\alpha f'(x)|<1$$

例如，用一般迭代法求方程

$$x^3-2x-5=0$$

在〔2，3〕内的根。

将方程在〔2，3〕上同解变形为

$$x=x-\alpha(x^3-2x-5)$$

而 $$M_1=\max_{x\in[2,3]}|f'(x)|=f'(3)=25$$

$$f'(x)>0,\ x\in[2,\ 3]$$

所以可以取 $\alpha=\frac{1}{13}<\frac{2}{25}$，则有迭代程序：

$$x_{n+1}=x_n-\frac{1}{13}(x_n^3-2x_n-5),\ n=0,\ 1,\ \cdots$$

一定收敛。

3　一般迭代法收敛定理中的条件是充分性的，实际对某些问题在〔a，b〕上不满足：

$$\rho=\max_{x\in[a,b]}|\varphi'(x)|<1$$

一般迭代法也收敛。

（1）在图2.12中表示在〔a，b〕上不满足：

$$\rho=\max_{x\in[a,b]}|\varphi'(x)|<1$$

但方法仍然收敛。

（2）在一般情况下，若在〔a，b〕上不满足：

$$\rho=\max|\varphi'(x)|<1$$

则一般迭代法不收敛，如图2.13所示。

4　在一般迭代法收敛定理中要证明的结论有三个：

（1）$x=\varphi(x)$在〔a，b〕内有唯一根x^*，

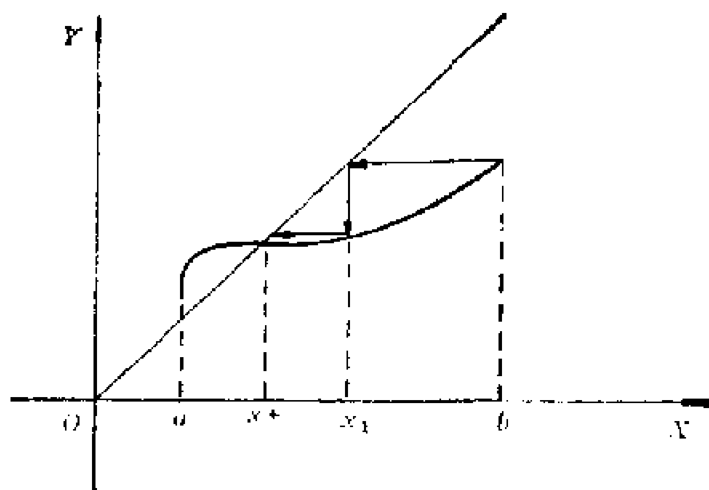


图 2.12

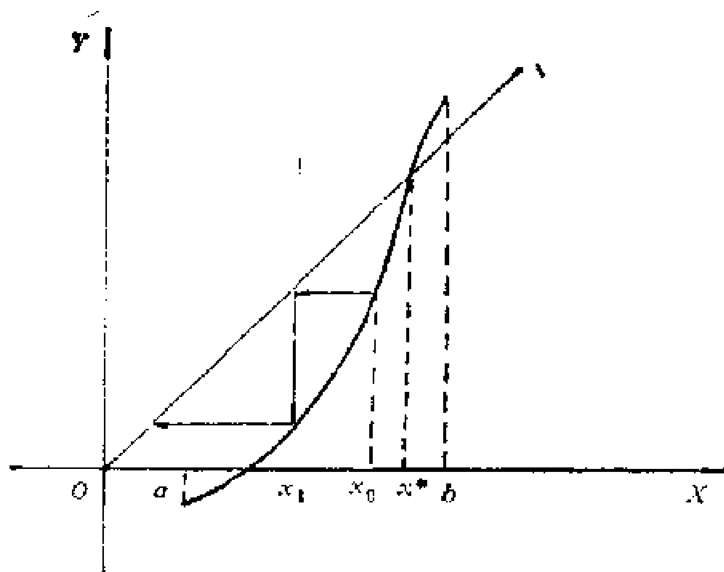


图 2.13

（2）$\{x_n\}$收敛，且收敛于x^*，

（3）有误差估计式：

$$|x_{n+1}-x^*|\leqslant\frac{\rho}{1-\rho}|x_{n+1}-x_n|$$

5　误差估计式：

$$|x_{n+1}-x^*|\leqslant\frac{\rho}{1-\rho}|x_{n+1}-x_n|$$

称为后天估计式，它只有在计算出x_n，x_{n+1}之后，才能估计出误差$|x_{n+1}-x^*|$。

在同样条件下，还可得到一般迭代法的先天误差估计式：

$$|x_n-x^*|\leqslant\frac{\rho^n}{1-\rho}|x_1-x_0|$$

证明如下：由后天估计式得，

$$|x_n-x^*|\leqslant\frac{\rho}{1-\rho}|x_n-x_{n-1}|$$

而由

$$\begin{aligned}|x_n-x_{n-1}|&=|\varphi(x_{n-1})-\varphi(x_{n-2})|\\&=|\varphi'(\xi_{n-1})|\cdot|x_{n-1}-x_{n-2}|\leqslant\rho\cdot|x_{n-1}\\&\quad-x_{n-2}|\leqslant\cdots\leqslant\rho^{n-1}\cdot|x_1-x_0|\end{aligned}$$

所以

$$|x_n-x^*|\leqslant\frac{\rho^n}{1-\rho}|x_1-x_0|$$

6　从收敛定理知：一般迭代法满足收敛条件，且$\varphi'(x^*)\neq0$，则方法具有线性敛速。如果适当选取$\varphi(x)$，使得$\varphi'(x^*)=0$，则可把敛速提高到二阶。这是因为：

$$\begin{aligned}&|x_{n+1}-x^*|=|\varphi(x_n)-\varphi(x^*)|\\&\leqslant|\varphi'(x^*)|\cdot|x_n-x^*|+\frac{1}{2}|\varphi''(\xi_n)|\cdot|x_n-x^*|^2\end{aligned}$$

当$\varphi'(x^*)=0$时，

$$\frac{|x_{n-1}-x^*|}{|x_n-x^*|^2}=\frac{1}{2}|\varphi''(\xi_n)|\to\frac{1}{2}|\varphi''(x^*)|$$

当$\varphi''(x^*)\neq0$时，方法有二阶敛速。

7　解题步骤：

（1）确定所求根x^*所在区间$[a, b]$，

（2）将方程

$$f(x)=0$$

同解变形为$x=\varphi(x)$，并验证是否满足收敛条件，

$$\rho = \max_{x\in[a,b]} |\varphi'(x)| < 1$$

如不满足，则再重新变形；如满足，则

（3）任取初始近似根$x_0 \in [a, b]$，一般常取，$x_0 = \frac{a+b}{2}$，

用迭代公式：

$$x_{n+1} = \varphi(x_n),\ n = 0,\ 1,\ \cdots$$

进行具体计算，直到满足精度要求为止。

§6 劈因子法

1　解二阶非线性方程组的牛顿法。

设二阶非线性方程组

$$\left.\begin{aligned} u(x,\ y) = 0 \\ v(x,\ y) = 0 \end{aligned}\right\} \qquad (6.1)$$

已知$(x_0,\ y_0)$为方程组的初始近似根。我们要求方程组更精确的近似根。

为此由泰勒公式得出u，v在$(x_0,\ y_0)$点附近的线性近似关系式：

$$\left.\begin{aligned} u(x,y) &\doteq u(x_0,y_0) + \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_0 (x - x_0) \\ &\quad + \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_0 (y - y_0) \\ v(x,y) &\doteq v(x_0,y_0) + \left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)_0 (x - x_0) \\ &\quad + \left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)_0 (y - y_0) \end{aligned}\right\}$$

于是得到（6.1）的近似方程组：

$$\left.\begin{aligned} \left(\frac{\partial u}{\partial u}\right)_0 (x - x_0) + \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_0 (y - y_0) + u(x_0,y_0) = 0 \\ \left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)_0 (x - x_0) + \left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)_0 (y - y_0) + v(x_0,y_0) = 0 \end{aligned}\right\} (6.2)$$

若由（6.2）可解得：

$$x_1 = x_0 + \Delta x_0,\quad y_1 = y_0 + \Delta y_0$$

则(x_1, y_1)就是更好的近似根。

然后再由（x_1，y_1）重复此过程，又可得到更好的近似根（x_2，y_2）……

下面讨论牛顿法的收敛性。

定理 如果$u(x,y)$，$v(x,y)$在有根的区域D上二阶连续可微，且

$$J(x^*, y^*) \neq 0$$

则当初值(x_0, y_0)充分接近于(x^*, y^*)时，牛顿法为平方收敛。

证明 解非线性方程组：

$$\begin{cases} u(x,y) = 0 \\ v(x,y) = 0 \end{cases} \tag{6.3}$$

可将（6.3）变成等价方程组：

$$\begin{cases} x = \varphi(x,y) \\ y = \psi(x,y) \end{cases} \tag{6.4}$$

写成向量形式，若记$X = (x,y)^T$，

$$\begin{aligned} \Phi(X) &= (\varphi(x,y),\ \psi(x,y))^T \\ &= (\varphi(X),\ \psi(X))^T \end{aligned}$$

则方程组（6.4）可写成向量方程：

$$X = \Phi(X) \tag{6.5}$$

同单个方程一样，可用简单迭代法求解，其迭代程序为：

$$X_{k+1} = \Phi(X_k),\quad k = 0,\ 1,\ \cdots \tag{6.6}$$

若$\{X_k\}$收敛于X^*，φ，ψ连续，则有

$$X^* = \Phi(X^*)$$

如果φ，ψ二阶连续可微，由泰劳公式可得误差向量满足

$$\Delta X_{k+1} = \Phi'(X^*)\Delta X_k + 0(\|\Delta X_k\|^2) \tag{6.7}$$

其中

$$\Phi'(X)=\begin{bmatrix}\varphi'_x & \varphi'_y\\ \psi'_x & \psi'_y\end{bmatrix} \tag{6.8}$$

由（6.7）知，当$\Phi'(X^*)=0$时，迭代法二次收敛．由（6.2）知牛顿法的迭代公式为：

$$\begin{bmatrix}x_{k+1}\\ y_{k+1}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x_k\\ y_k\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}u'_x & u'_y\\ v'_x & v'_y\end{bmatrix}_k^{-1}\cdot\begin{bmatrix}u_k\\ v_k\end{bmatrix} \tag{6.9}$$

$$K=0,\ 1,\ \cdots$$

则有

$$\Phi(X)=\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}u'_x & u'_y\\ v'_x & v'_y\end{bmatrix}^{-1}\cdot\begin{bmatrix}u\\ v\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}f\\ g\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x-f\\ y-g\end{bmatrix}$$

其中

$$\begin{bmatrix}f\\ g\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}u'_x & u'_y\\ v'_x & v'_y\end{bmatrix}^{-1}\cdot\begin{bmatrix}u\\ v\end{bmatrix}$$

$$f=\frac{u\cdot v'_y-v\cdot u'_y}{|J(X)|}$$

$$g=\frac{v\cdot u'_x-u\cdot v'_x}{|J(X)|}$$

$$|J(X)|=\begin{vmatrix}u'_x & u'_y\\ v'_x & v'_y\end{vmatrix}$$

所以有

$$\Phi'(X)=\begin{bmatrix}1-f'_x & -f'_y\\ -g'_x & 1-g'_y\end{bmatrix}$$

而

$$f'_x(X^*)=\frac{(u'_x v'_y-v'_x u'_y)x^*}{|J(X^*)|}=1$$

$$f'_y(X^*) = \frac{(u'_y v'_y - v'_y u'_y)X^*}{|J(X^*)|} = 0$$

$$g'_x(X^*) = \frac{(u'_x v'_x - v'_x u'_x)X^*}{|J(X^*)|} = 0$$

$$g'_y(X^*) = \frac{(u'_x v'_y - v'_x u'_y)X^*}{|J(X^*)|} = 1$$

所以有

$$\Phi'(X^*) = 0$$

牛顿法为平方收敛。

2 劈因子法的基本思想是：

假设准确二次因子为：

$$x^2 + p^*x + g^*$$

初始近似二次因子为：

$$x^2 + px + g$$

则有

$$f(x) = (x^2 + px + q)Q(x) + R_1x + R_2$$

其中 R_1，R_2为p，q 的函数，记作

$$R_1 = R_1(p,q),\quad R_2 = R_2(p,q)$$

且有

$$\begin{cases} R_1(p^*,q^*) = 0 \\ R_2(p^*,q^*) = 0 \end{cases}$$

我们求p^*，q^*就等价于求下方程组：

$$\begin{cases} R_1(p,\ q) = 0 \\ R_2(p,\ q) = 0 \end{cases} \tag{6.10}$$

的根，而劈因子法正是解（6.10）的近似方程组：

$$\begin{cases} R_1(p,q) + \dfrac{\partial R_1}{\partial p}\Delta p + \dfrac{\partial R_1}{\partial q}\Delta q = 0 \\ R_2(p,q) + \dfrac{\partial R_2}{\partial q}\Delta p + \dfrac{\partial R_2}{\partial q}\Delta p = 0 \end{cases} \tag{6.11}$$

求出 Δp，Δq，取

$$p_1 = p + \Delta p, \quad q_1 = q + \Delta q$$

作为p^*，q^*新的近似值。由此可知这正是用牛顿法解非线性方程组（6.10）。

3　解题步骤：

（1）选取适当好的初值 p_0，q_0，

（2）由p_r，q_r（$r=0, 1, \cdots$）进行计算：

$$b_k = a_k - p_r b_{k-1} - q_r b_{k-2}, \quad k=0, 1, \cdots, n$$

$$c_k = b_k - p_r c_{k-1} - q_r c_{k-2}, \quad k=0, 1, \cdots, n-1$$

其中　$b_{-1} = b_{-2} = c_{-1} = c_{-2} = 0$。

（3）计算：

$$\Delta p_r = (b_{n-1} c_{n-2} - b_n \cdot c_{n-3})/\delta$$

$$\Delta q_r = (b_n c_{n-2} - b_{n-1}(c_{n-1} - b_{n-1}))/\delta$$

其中　$\delta = c_{n-2}^2 - (c_{n-1} - b_{n-1}) \cdot c_{n-3}$。

（4）计算：

$$P_{r+1} = P_r + \Delta P_r$$

$$q_{r+1} = q_r + \Delta q_r$$

直到满足精度要求为止。

4　劈因子法的初始近似因子常取为：

$$f(x) = x^n + a_1 x^{n-1} + \cdots + a_{n-2} x^2 + a_{n-1} x + a_n$$

的末尾二次因式：

$$x^2 + \frac{a_{n-1}}{a_{n-2}} x + \frac{a_n}{a_{n-2}}$$

这样迭代结果所求得的二次因式为对应于方程 $f(x)=0$ 一对最小复根的二次因式，其理由如下：

设方程 $f(x)=0$ 的 n 个根为

$$|x_1| \geqslant |x_2| \geqslant \cdots \geqslant |x_{n-2}| > |x_{n-1}| \geqslant |x_n|$$

则由根与系数关系有：

$$a_n = x_1 x_2 \cdots x_{n-1} x_n$$

$$a_{n-1} = (-1)^{n-1} x_1 x_2 \cdots x_{n-1} + x_1 \cdots x_{n-2} x_n$$

$$a_{n-2} \doteq (-1)^{n-2} x_1 \cdots x_{n-3} x_{n-2}$$

所以有

$$\frac{a_n}{a_{n-2}} \doteq x_{n-1} \cdot x_n$$

$$\frac{a_{n-1}}{a_{n-2}} \doteq x_{n-1} + x_n$$

即

$$x^2 + \frac{a_{n-1}}{a_{n-2}} x + \frac{a_n}{a_{n-2}} = 0$$

对应于二根近似于 $-x_{n-1}$， $-x_n$。

四 复习思考题

1 用区间二分法确定方程

$$x^3 + 2x - 5 = 0$$

最小正根所在区间 $[a, b]$，使得在此区间上满足条件：

$$K = \frac{M_2}{2m_1} < 1$$

2 试叙述单点弦法的迭代公式，收敛条件，并用单点弦法求方程：

$$x^3 + 2x - 5 = 0$$

的最小正根（精确到 10^{-2}）。

3 试导出计算 $\frac{1}{b}$ 的双点弦法迭代公式，并用此公式计算 $\frac{1}{3}$（精确到 10^{-3}）。

4 试导出计算 $\sqrt[m]{a}\,(a>0)$ 的牛顿程序，并用它计算 $\sqrt[5]{2}$（精确到 10^{-3}）。

5 试证明当 $\varphi(x)$ 三次连续可微，且 $\varphi'(x^*)=0$，$\varphi''(x^*)=0$，则当 x_0 充分接近 x^* 时，一般迭代法收敛，且至少具有三阶敛速。

6 试确定使得迭代公式：

$$x_{k+1}=x_k+\alpha f(x_k), \quad k=0, 1, \cdots$$

收敛的α取值范围。并用它求方程：

$$x^3+2x-5=0$$

的最小正根（精确到10^{-3}）。

五 本章小结

现将本章学习解代数（超越）方程的五个方法的实用范围，迭代公式，收敛条件，收敛速度，误差估计式列入下面表格中，以便读者进行比较和更好的掌握它们。

方法		用处	迭代公式	收敛条件	敛速	误差估计式
区间二分法		求代数（超越）方程实根	$x_{n+1}=\frac{1}{2}(a_n+b_n)$，由$f(x_{n+1})$符号确定$[a_{n+1}, b_{n+1}]$	$f(x)$连续	线性（同公比$\frac{1}{2}$几何级数）	$\|x_n-x^*\| \leqslant \frac{1}{2^n}(b-a)$
弦截法	单点	〃	$x_{n+1}=x_n-\frac{b-x_n}{f(b)-f(x_n)}f(x_n)$	$f'(x)$、$f''(x)$连续，不变号，$f'(x)f''(x)>0$	线性	$\|x_n-x^*\| \leqslant \frac{\rho}{1-\rho}\|x_n-x_{n-1}\|$
	双点	〃	$x_{n+1}=x_n-\frac{x_n-x_{n-1}}{f(x_n)-f(x_{n-1})}f(x_n)$	$f'(x)f''(x)$连续，不变号，$f(x_0)f''(x)>0$，$f(x_1)f''(x)>0$，	超线性(1.618)	$\|x_n-x^*\| \leqslant \frac{M_2}{2m_1}\|x_n-x_{n-1}\|\cdot\|x_n-x_{n-2}\|$
切线法		〃 〃	$x_{n+1}=x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$	$f'(x)$，$f''(x)$连续，不变号，$f(x_0)f''(x)>0$	平方	$\|x_n-x^*\| \leqslant \frac{M_2}{2m_1}\|x_n-x_{n-1}\|^2$
一般迭代法		〃 〃	$x_{n+1}=\varphi(x_n)$	$\rho=\max\limits_{a\leqslant x\leqslant b}\|\varphi'(x)\|<1$	线性	$\|x_n-x^*\| \leqslant \frac{\rho}{1-\rho}\|x_n-x_{n-1}\|$
劈因子法		求代数方程复根	由p_r，q_r计算b_k，c_k，Δp_r，Δq_r，p_{r+1}，q_{r+1}	p_0，q_0适当接近于p^*，p^*	平方	同切线法

第三章　线性代数计算法学习指导

一　主要内容

本章内容分为两部份：

1　解线性方程组；

2　求矩阵的特征值及特征向量。

解决这些问题的方法一般分为两类：一类是精确法；一类是迭代法。

关于解方程组的精确法主要介绍全主元消元法，适用于特殊阵的改进平方根法、以及追赶法、共轭斜量法、加边求逆法。

关于解方程组的迭代法主要介绍了简单迭代法、采德尔迭代法、最速下降法。

关于求特征值主要介绍了求最大、最小特征值的幂方法，求实对称阵任一特征值的二分法，以及求全部特征值的 QR 方法。

二　基本要求

1　对每一个方法的掌握，应该弄清楚它的基本思想，适用范围，收敛条件，计算公式以及对于误差的估计。

2　在对待计算题目与必要的理论研究不应偏废，不能单纯注意运算不去研究定理的证明，这容易出现有了问题说不清楚，得到错误结果；也不能单纯研究理论证明而怕计算麻烦，费时间不愿去解题。当遇到实际问题时，无从下手。应坚持理

论联系实际的原则，有条件的地方应该上机运算为好。

3　对于每一个方法，要反复不断加深理解，各种不同方法应相互比较找出差异，指出优缺点。

三　内容分析

§1　引　　言

1　用克莱姆法则求 n 阶线性方程组的解时，需要计算 $n+1$ 个行列式，而每一个行列式求值需要做 $(n-1)n!$ 次乘法运算，然后又要做 n 次除法运算。用克莱姆法则求解的乘除法次数为　$S=(n^2-1)n!+n$，

当　$n=8$ 时，$S=2,540,168$

当　$n=20$ 时，$S\doteq 9.7\times 10^{20}$

这个工作量，恐怕一个人一辈子也算不完，为此对于数值方法的研究就显得很有必要了。

2　精确法和迭代法是两个不同类型的方法，因为有些精确法存贮和计算量很大，而且对于稀疏阵又显得不够恰当，另外有舍入误差的影响，所得结果并不精确，为此引进迭代方法。不论用那种方法得到的结果 $\overline{x}$，一般是近似的。误差可表示为　　$e=\overline{x}-x^*$。

3　如何评价一个方法的好坏，一般要进行复杂性的分析。即要看到方法本身的难易程度，又要考虑其收敛速度，同时对于机器的占有时间也不可忽视。单纯用一个指标来衡量，往往是片面的。

4　对于一个方法的选择一定要注意条件的要求，每个方法都是针对不同类型问题提出来的，忽视了这一点将会得到错误结果。

§2 消 元 法

1　简单消元法，实际上就是大家熟知的按自然顺序的加减消元法．(3.1) ～ (3.4) 称消元过程，(3.6) 称回代过程．简单消元法是最基本的消元法，其他消元法都是由此派生出来的．

解 n 阶线性方程组，简单消元法所需乘除法的运算次数是

$$S=\frac{n}{3}(n^2+3n-1)$$

与克莱姆法则运算量相比较如下表

	$n=2$	$n=4$	$n=6$
克莱姆法则	8	364	25206
简单消元法	6	36	106

可见用克莱姆法则，当 n 增大时，其运算量比简单消元法的运算量大得多．

2　简单消元法，要求按顺序从第一个未知数 x_1 开始消元，行列不能交换，为此要求 $a_{ii}^{(i-1)}\neq 0$　$(i=1,2\cdots,n-1)$．只要中间有一步，比如$a_{kk}^{(k-1)}=0$，此法就不能进行下去了．什么样类型的阵具有这样性质呢？那就是阵A 的所有主子式非奇异方可．这样就有局限性了．另外具体判断起来也是件难事，所以简单消元法在实际中不太适用．

3　主元消元法，只要 $|A|\neq 0$ 就可进行，所以是实际中一种有效的方法，而且可以证明，在计算过程中是数值稳定性方法，比如第一章学习指导 § 4—3 中所举例子就说明了这个问题．

4　在同时解几组右端项不同的方程组时，用有回代过程的消元法解，要一组一组单独进行，比较复杂，往往人们采用无回代过程消元法进行，消元结束，解就可以求出来．从形式上来看好象简单了一些，实际上统计一下计算量，一点都不少，反而要比有回代的主元素法多$\frac{1}{6}(n^3-2n^2+3n)$次乘除法运算，所以在机器上不被采用，但它在手算上比较工整，还可以用。

§3　矩阵的三角分解

1　解方程组　$\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$，当 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LR}$ 时，就可变为解方程组

$$\boldsymbol{Ly}=\boldsymbol{b}$$

$$\boldsymbol{Rx}=\boldsymbol{y}$$

其中$\boldsymbol{L}$为单位下三角阵，$\boldsymbol{R}$为上三角阵．计算 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{b}$就是消元，解$\boldsymbol{Rx}=\boldsymbol{y}$就是回代。

2　n 阶方阵 $\boldsymbol{A}$可以唯一分解为 $\boldsymbol{LR}$，必须满足各阶主子矩阵非奇异的条件，否则若只满足阵 $\boldsymbol{A}$ 非奇异，则不一定有$\boldsymbol{LR}$唯一分解。

例如

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}$$

显然，其中阵$\boldsymbol{A}$非奇异，但一阶主子矩阵是奇异的，所以阵 $\boldsymbol{A}$ 就不能分解为 $\boldsymbol{LR}$。

3　$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LR}$ 的分解唯一性是指特定形式而言，否则分解不唯一．当$\boldsymbol{L}$为单位下三角阵，$\boldsymbol{R}$ 为上三角阵，称为矩阵$\boldsymbol{A}$的Doolittle分解，当$\boldsymbol{L}$为下三角阵而$\boldsymbol{R}$为单位上三角阵，称为矩阵$\boldsymbol{A}$的Crout　分解．为确保分解的唯一性，对分解式规格化为

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LDU}$$

其中$\boldsymbol{L}$为单位下三角阵，$\boldsymbol{U}$ 为单位上三角阵，$\boldsymbol{D}$ 为对角阵，称

此为A的 LDU 分解。以上三种分解是唯一的。

4 矩阵

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 3 & 5 & 2 \\ 4 & 3 & 30 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3/2 & 1 & 0 \\ 0 & -6 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 0 & 1/2 & -4 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}$$

的具体分解步骤如下：

用消元阵

$$\boldsymbol{L}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -3/2 & 1 & 0 \\ -2 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

左乘阵$\boldsymbol{A}$，则有

$$\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -3/2 & 1 & 0 \\ -2 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 3 & 5 & 2 \\ 4 & 3 & 30 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 0 & 1/2 & -4 \\ 0 & -3 & 22 \end{pmatrix} = \boldsymbol{A}_1$$

同理用$\boldsymbol{L}_2$左乘$\boldsymbol{A}_1$得

$$\boldsymbol{L}_2\boldsymbol{A}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 6 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 0 & 1/2 & -4 \\ 0 & -3 & 22 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 0 & 1/2 & -4 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} = \boldsymbol{R}$$

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{L}_1^{-1}\boldsymbol{L}_2^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3/2 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -6 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3/2 & 1 & 0 \\ 2 & -6 & 1 \end{pmatrix}$$

§4 紧凑格式与改进平方根法

1 为了便于对（4.4）式的使用和记忆，求$\boldsymbol{L}$、$\boldsymbol{R}$各元素的计算时，可按表 1 逐步地进行。

设

$$L=\begin{pmatrix}1 & & & \\ l_{21} & 1 & & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \\ \vdots & \vdots & & \ddots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1\end{pmatrix},\qquad R=\begin{pmatrix}r_{11} & r_{12}\cdots r_{1n} \\ & r_{22}\cdots r_{2n} \\ & \ddots\ \vdots \\ 0 & r_{nn}\end{pmatrix}$$

$$LR=\begin{pmatrix}1 & & & \\ l_{21} & 1 & & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \\ \vdots & \vdots & & \ddots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}r_{11} & r_{12}\cdots r_{1n} \\ & r_{22}\cdots r_{2n} \\ & \ddots\ \vdots \\ 0 & r_{nn}\end{pmatrix}$$

然后将待求元素划分成Ⅰ、Ⅱ、Ⅲ，…框，逐框来求，具体计算如下：

r_{11}	r_{12}	r_{13}	r_{14}	$r_{15}\cdots r_{1n}$	Ⅰ
l_{21}	r_{22}	r_{23}	r_{24}	$r_{25}\cdots r_{2n}$	Ⅱ
l_{31}	l_{32}	r_{33}	r_{34}	$r_{35}\cdots r_{3n}$	Ⅲ
l_{41}	l_{42}	l_{43}	r_{44}	$r_{45}\cdots r_{4n}$	Ⅳ
$l_{51}\ \vdots\ l_{n1}$	$l_{52}\ \vdots\ l_{n2}$	$l_{53}\ \vdots\ l_{n3}$	$l_{54}\ \vdots\ l_{n4}$	……	

Ⅰ中的元素：

$$\begin{cases}r_{1j}=a_{1j}, & j=1,\ 2,\ \cdots,\ n \\ l_{i1}=a_{i1}/r_{11}, & i=2,\ 3,\ \cdots,\ n\end{cases}$$

从Ⅱ，Ⅲ，…中按下列公式计算：

$$
\begin{cases}
r_{kj} = a_{kj} - (l_{k1}r_{1j} + l_{k2}r_{2j} + \cdots + l_{k,k-1}r_{k-1,j}) \\
\qquad\qquad j = k, k+1, \cdots, n \\
\qquad\qquad k = 2, 3, \cdots, n \\
l_{ik} = [a_{ik} - (l_{i1}r_{1k} + l_{i2}r_{2k} + \cdots + l_{i,k-1}r_{k-1,k})]/r_{kk} \\
\qquad\qquad i = k+1, k+2, \cdots, n
\end{cases}
$$

如计算 $r_{45} = a_{45} - (l_{41}r_{15} + l_{42}r_{25} + l_{43}r_{35})$

再计算 $l_{54} = [a_{54} - (l_{51}r_{14} + l_{52}r_{24} + l_{53}r_{34})]/r_{44}$

这种方法，通过A的元素和已求出前框的数，直接求出待求各框的数，不必计算中间结果。这种格式称为紧凑格式，适用于手算．公式化了，比较直观。它实质上就是消元法的过程，只是中间结果省略而已，在机器上运算并不简单。

2　解对称系数阵方程组的改进平方根法

由于对称方阵是属于一类常见的特殊方阵，为此根据其特点，由公式(4.4)、(4.5)、(4.6)推得在$A = A^T$时的具体形式(4.9)、(4.10)、(4.11)改进平方根法，实际上就是紧凑格式在解对称系数阵方程组上的具体应用。

在此以三阶阵为例，介绍一下带开方运算的平方根法．设

$$
A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = A^T
$$

$$
\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & 0 \\ l_{12} & l_{22} & 0 \\ l_{13} & l_{23} & l_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{11} & l_{12} & l_{13} \\ 0 & l_{22} & l_{23} \\ 0 & 0 & l_{33} \end{pmatrix}
$$

根据矩阵乘法及矩阵相等的的概念，得

$$
\left.\begin{array}{ll}
l_{11}^2 = a_{11}, & l_{11} = \sqrt{a_{11}} \\
l_{11}l_{12} = a_{12}, & l_{12} = a_{12}/l_{11} \\
l_{11}l_{13} = a_{13}, & l_{13} = a_{13}/l_{11}
\end{array}\right\}
$$

$$\left.\begin{array}{ll} l_{12}^2+l_{22}^2=a_{22}, & l_{22}=\sqrt{a_{22}-l_{12}^2} \\ l_{12}l_{13}+l_{22}l_{23}=a_{23}, & l_{23}=(a_{23}-l_{12}l_{13})/l_{22} \\ l_{13}^2+l_{23}^2+l_{33}^2=a_{33}, & l_{33}=\sqrt{a_{33}-l_{13}^2-l_{23}^2} \end{array}\right\} \quad (1)$$

可见由公式（1）求l_{11}，l_{22}，l_{33}时，需要进行开方运算，为此称为平方根法。由于进行开方运算，无论上机运算，或手算都很麻烦，故提出几种改进平方根法。

§6 逆矩阵计算法

1　判别阵A是否可逆的方法共有三种：

（1）计算$\det(A)\neq 0$；

（2）若阵A强对角占优阵，则A非奇异；

（3）若阵A是不可约对角占优阵，则A非奇异。

实际上这三种方法，（2）比较直观，但是只适用于特殊阵。（1）、（3）实现起来比较困难。实际中除需要判断矩阵是否非奇异外，而往往要求出A^{-1}的具体形式，本节给出两个求逆的方法。

2　注意本段用到的代数知识：

（1）若L为单位下三角阵，则L^{-1}存在，也是单位下三角阵，并且有

$$|L|=|L^{-1}|=1$$

（2）若R为上三角阵，则

$$|R|=r_{11}r_{22}\cdots r_{nn}$$

其中r_{ii}为R的主对角元素。

（3）定理1是针对行来证明的，但对矩阵的列对角占优也成立。如

$$B=\begin{pmatrix} 3 & -1 & 3 \\ -1 & 5 & 2 \\ 1 & 2 & 6 \end{pmatrix}$$

的行并不对角占优，但列对角占优。故B也可逆。实际上B^T是行对角占优，因为$|B| = |B^T| \neq 0$，故B可逆。

3　求逆矩阵

（1）消元法求逆

用消元法求逆，实质上就是解一个同系数以I的n个列向量作为右端的方程组求解问题，即

$$\begin{array}{c|c} A & I \\ \hline I & A^{-1} \end{array}$$

例　求

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

的逆矩阵　A^{-1}。用简单消元法列表计算如下：

Ⅰ	2	1	1	1	0	0	
Ⅱ	1	2	1	0	1	0	
Ⅲ	1	1	2	0	0	1	
$Ⅰ_1$	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	0	$Ⅰ \div 2$
$Ⅱ_1$	0	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	1	0	$Ⅱ - Ⅰ_1$
$Ⅲ_1$	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	1	$Ⅲ - Ⅰ_1$
$Ⅰ_2$	1	0	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$	$-\frac{1}{3}$	0	$Ⅱ_2 \times (-\frac{1}{2}) + Ⅰ_1$
$Ⅱ_2$	0	1	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$	0	$Ⅱ_1 \div \frac{3}{2}$
$Ⅲ_2$	0	0	$\frac{4}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	1	$Ⅱ_2 \times (-\frac{1}{2}) + Ⅲ_1$
$Ⅰ_3$	1	0	0	$\frac{3}{4}$	$-\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$	$Ⅲ_3 \times (-\frac{1}{3}) + Ⅰ_1$
$Ⅱ_3$	0	1	0	$-\frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}$	$-\frac{1}{4}$	$Ⅲ_3 \times (-\frac{1}{3}) + Ⅱ_2$
$Ⅲ_3$	0	0	1	$-\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}$	$Ⅲ_2 \div \frac{4}{3}$

（2）若已知$A=LR$，则

$$A^{-1}=(LR)^{-1}=R^{-1}L^{-1}$$

于是求A^{-1}的问题转化为求A的Doolittle分解阵L^{-1}、R^{-1}的问题了。L^{-1}、R^{-1}比较容易求，这也是一种求逆方法。

§7　向量和矩阵的范数

在线性代数方程组的数值解法中，需要讨论某些方法的收敛性，或进行误差分析，这就需要对向量和矩阵的大小给出一种度量方法，于是引进范数的概念。

1　向量的范数，实质上是解析几何中向量长度概念的推广。

三角不等式

$$\|x+y\|\leqslant\|x\|+\|y\|$$

及

$$\|x-y\|\geqslant\|x\|-\|y\|$$

$$\|x+y\|\geqslant\|x\|-\|y\|$$

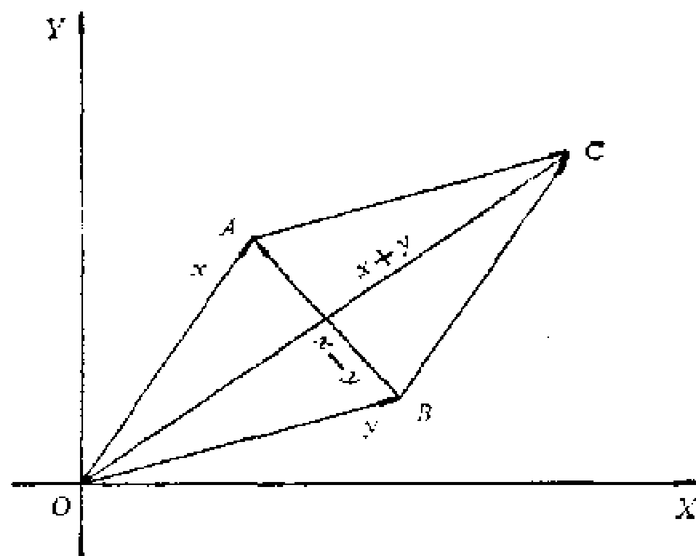


图3·1

有着明显的几何意义，它们表示着任一三角形两边之和大于第三边，两边之差小于第三边。如图3·1所示。

（a）向量x和y的差“$x-y$”的范数就是x和y的终点之距离。

（b）向量x和y的范数$\|x\|$，$\|y\|$它表示向量本身的始点到终点之距离。所以说，在二维或三维空间中的范数用距离来解释，有着普通长度的性质，特别对模$\|x\|_2=\sqrt{(x,x)}$来讲是这样。

2　范数的等效性，按三种范数定义，对同一向量求范数所得结果是不同的。例如对

$$e=(\overbrace{1,\ 1,\ \cdots,\ 1}^{n个})^T$$

常用的三种范数为

$$\|e\|_1=\overbrace{1+1+\cdots+1}^{n个}=n$$

$$\|e\|_2=\sqrt{1+1+\cdots+1}=\sqrt{n}$$

$$\|e\|_\infty=\max_i|\xi_i|=1$$

但在各种范数意义下考虑向量序列的收敛性问题时，其收敛性都是一样的，这种性质就是范数的“等效性”。之所以提出这样或那样的范数，是因为某一个问题可能是对第一范数是方便的，对另一种范数是不方便的等等。

3　在$R^{(n)}$中定义的三种范数是互相等价的。

所谓两个范数等价是指：若范数$\|x\|$、$\|x\|_1$之间总存在正常数m，M有关系式

$$m\|x\|_1\leqslant\|x\|\leqslant M\|x\|_1$$

成立，现在来证明$\|x\|_1$和$\|x\|_2$等价

根据定理3知，$\|x\|_1$与$\|x\|$等价，即存在正常数m，M使

$$m\leqslant\frac{\|x\|}{\|x\|_1}\leqslant M$$

成立。$\|x\|$与$\|x\|_2$等价，存在正常数n、N使

$$n \leqslant \frac{\|x\|_2}{\|x\|} \leqslant N$$

成立。于是有

$$m \cdot n \leqslant \frac{\|x\|}{\|x\|_1} \cdot \frac{\|x\|_2}{\|x\|} \leqslant M \cdot N$$

即

$$m \cdot n\|x\|_1 \leqslant \|x\|_2 \leqslant M \cdot N\|x\|_1$$

即$\|x\|_1$ 与$\|x\|_2$ 等价。

4　矩阵的范数

向量与矩阵常常以Ax 的形式出现，因此矩阵的范数与向量的范数就不能各自独立的去规定，而必须相互匹配，互相协调。一般要求

$$\|Ax\| \leqslant \|A\| \cdot \|x\|$$

这就是所谓相容性条件，它表明向量范数已具体规定了，那末与之相应的矩阵范数必须受到适当限制。

n 阶方阵 A的范数 $\|A\|$，一般我们按下面相容性条件来确定

$$\|A\| = \sup_{\|x\|=1} \|Ax\|$$

这样定义出的矩阵范数，与向量 x的已知范数是协调的。

5　若A非奇异，则当 $\|A^{-1}\delta A\| < 1$时，$A + \delta A$也非奇异。

证　因为当$\|A^{-1}\delta A\| < 1$时 $I + A^{-1}\delta A$ 非奇异，而

$$A + \delta A = A(I + A^{-1}\delta A)$$

所以$A + \delta A$是非奇异阵。

6　证明$\|A\|_\infty = \max\limits_i \sum\limits_{j=1}^{n} |a_{ij}| = \mu$。

首先证明对任意$\|x\|_\infty = 1$，$\|A\|_\infty = \mu$。因为

$$\|Ax\|_\infty = \max_i \left|\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j\right|$$

$$\leqslant \max_{i} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| \ |x_j| \leqslant \mu$$

其次证明，假设方阵A第k行元素绝对值之和等于μ，即

$$\sum_{j=1}^{n} |a_{kj}| = \max_{i} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| = \mu$$

取向量y，使其分量满足

$$y = \begin{cases} 1 & a_{kj} \geqslant 0 \\ -1 & a_{kj} < 0, \ j = 1, 2, \cdots, n \end{cases}$$

显然

$$\|y\|_\infty = \max_{j} |y_j| = 1$$

而

$$\|Ay\|_\infty = \max_{i} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| = \mu$$

所以

$$\|A\| = \max_{\|x\|=1} \|Ax\|_\infty = \max_{i} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| = \|A\|_\infty$$

7　线性方程组的性态

1°　$\text{cond}(A) = \|A^{-1}\| \ \|A\|$在某种程度上刻化了方程组的解对原始数据变化的灵敏程度，若原始数据有微小变化，而解发生了巨大变化，则称之为是一个“病态”问题．那么究竟条件数多大矩阵才算病态，一般来说是没有具体标准的，也只是相对而言．

2°　若$A = A^T$

$$\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{max}(A^T A)} = |\lambda_1|$$

$$\|A^{-1}\|_2 = \sqrt{\lambda_{max}(A^{-T} A^{-1})} = \sqrt{\frac{1}{\lambda_{min}(A^T A)}} = \frac{1}{|\lambda_n|}$$

所以

$$\text{cond}(A) = |\lambda_1| / |\lambda_n|$$

其中 λ_1与λ_n分别为矩阵A的按模最大和最小特征值。

3° 由于 $\text{cond}(A)=\|A^{-1}\|\ \|A\|$，涉及到 A^{-1} 的计算问题，所以具体求条件数工作量比较大。矩阵病态情况事先又难以知道，怎么办呢？通常情况下，是通过一些可能产生矩阵病态的现象来进行判断：

（Ⅰ）矩阵元素间的数量级相差很远，大的很大，小的很小，并且无一定规则。

（Ⅱ）矩阵的行列式值相对来说很小，或某些行（列）近似地线性相关。

（Ⅲ）消元过程中出现有效数位严重损失，或主元数值很小，以及出现相近数相减。

（Ⅳ）残量 r_k 已很小，但仍不符合规律。

出现以上情况可按"病态"来加以处理。

4° 产生病态的原因有两种，一是问题本身病态，另一种是计算方法选择不合理，为此在选择方法上应多加注意。

§8 简单迭代法

1 两种迭代法的区别

简单迭代法是指当 $A=M-N$时，迭代程序

$$\begin{aligned}x&=M^{-1}Nx+M^{-1}b\\&=Bx+f\end{aligned}$$

其中阵B的对角元素 b_{ii}，$i=1,2\cdots$，n为任意实数。

雅可比迭代法是指当矩阵A的对角元素 $a_{ii}\neq 0$，$i=1,2,\cdots$，n 时，迭代程序

$$\begin{aligned}x&=D^{-1}Nx+D^{-1}b\\&=Bx+f\end{aligned}$$

其中阵B的对角元素$b_{ii}=0$，$i=1,2\cdots,n$。

实际上雅可比迭代法是简单迭代法的一个特例。简单迭

代法是一阶定常迭代法，因为计算 x_{k+1} 只涉及x_k，且计算规则，不依 k 而改变。

2　由于两种方法迭代矩阵$M^{-1}N$，$D^{-1}N$不一样，所以收敛条件一般是不一样的，在具体应用时不应混淆。

3　收敛性的定理 2 只是收敛的充分条件，不满足定理 2 条件的迭代阵 B，不一定不收敛。

例如迭代矩阵

$$B=\begin{pmatrix} \frac{2}{3} & \frac{2}{3} & \frac{2}{3} \\ -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & 0 \\ \frac{1}{3} & 0 & \frac{1}{3} \end{pmatrix}$$

根据定理 2 来判定

$$\max_i \sum_{j=1}^{3} |b_{ij}| = \tfrac{2}{3}+\tfrac{2}{3}+\tfrac{2}{3}=\tfrac{6}{3}=2>1$$

$$\max_j \sum_{i=1}^{3} |b_{ij}| = \tfrac{2}{3}+\left|-\tfrac{1}{3}\right|+\left|-\tfrac{1}{3}\right|=\tfrac{4}{3}>1$$

显然不满足定理 2 的收敛条件，事实上此迭代程序$x=Bx+f$是收敛的，因为$\rho(B)<1$。

4　解题步骤

（1）将给定的方程组$Ax=b$化成迭代的形式

$x=Bx+f$

（2）检验其收敛条件，首先用定理 2 或定理 3 判定。

（3）取初始向量x_0。

（4）具体进行计算，直算到在所要求的精度内

$x_{k+1}\doteq x_k$　时为止。

§9　采德尔迭代法

1　采德尔迭代法是简单迭代法的一种变形，采德尔迭代程序写成分量的形式为

$$x_i^{(k+1)} = \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} x_j^{(k+1)} + \sum_{j=i}^{n} b_{ij} x_j^{(k)} + f_i,$$
$$i = 1, 2, \cdots, n$$

写成矩阵的形式为

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{x}_{k+1} + \boldsymbol{U}\boldsymbol{x}_k + \boldsymbol{f}$$

为明确起见，不妨在此举例说明如下：

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{f}$$

其中

$$\boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, x_3)^T, \quad \boldsymbol{f} = (f_1, f_2, f_3)^T$$

显然简单迭代程序为

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}_k + \boldsymbol{f}$$

而采德尔迭代法是相当于把迭代矩阵$\boldsymbol{B}$分解为

$$\boldsymbol{L} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ b_{21} & 0 & 0 \\ b_{31} & b_{32} & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ 0 & b_{22} & b_{23} \\ 0 & 0 & b_{33} \end{pmatrix}$$

则采德尔程序为

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{x}_{k+1} + \boldsymbol{U}\boldsymbol{x}_k + \boldsymbol{f}$$

在计算分量时，为明确起见可列表说明如下

$\boldsymbol{x}_i$	$x_1^{(i)}$	$x_2^{(i)}$	$x_3^{(i)}$	f_i
	b_{11}	b_{12}	b_{13}	f_1
	b_{21}	b_{22}	b_{23}	f_2
	b_{31}	b_{32}	b_{33}	f_3
$\boldsymbol{x}_0$	$x_1^{(0)}$	$x_2^{(0)}$	$x_3^{(0)}$	任取初值$\boldsymbol{x}_0$
$\boldsymbol{x}_1$	$x_1^{(1)}$	$x_2^{(1)}$	$x_3^{(1)}$	

计算向量x_1的第一个分量

$$x_1^{(1)}=b_{11}x_1^{(0)}+b_{12}x_2^{(0)}+b_{13}x_3^{(0)}+f_1$$

时，与简单迭代法完全一致。

计算向量 x_1的第二个分量 $x_2^{(1)}$时，用简单迭代法与采德尔迭代法的异同处，

$$x_2^{(1)}=\boxed{b_{21}x_1^{(0)}}+b_{22}x_2^{(0)}+b_{23}x_3^{(0)}+f_2$$

不同

$$x_2^{(1)}=\boxed{b_{21}x_1^{(1)}}+b_{22}x_2^{(0)}+b_{23}x_3^{(0)}+f_2$$

计算x_1的第三个分量时

$$x_3^{(1)}=\boxed{b_{31}x_1^{(0)}+b_{32}x_2^{(0)}}+b_{33}x_3^{(0)}+f_3$$

不同

$$x_3^{(1)}=\boxed{b_{31}x_1^{(1)}+b_{32}x_2^{(1)}}+b_{33}x_3^{(0)}+f_3$$

显然书中的(9.2)、(9.4)式揭示了采德尔迭代法与简单迭代法的关系。

2　关于简单迭代法与采德尔迭代法收敛域的分析：

（1）当 $\mu\leqslant\|B\|_\infty<1$时，简单迭代法与采德尔迭代法都收敛，但收敛速度不一样，后者比前者快些。

（2）由于二者的迭代矩阵不一样，所以有时可能前者收敛，后者不收敛，或反之。

例 1　设迭代矩阵

$$B=\begin{bmatrix}5 & -5\\ 1 & 0.1\end{bmatrix}$$

则

$$|\lambda I-B|=\begin{vmatrix}\lambda-5 & 5\\ -1 & \lambda-0.1\end{vmatrix}=\lambda^2-5.1\lambda+5.5$$

故其模最大根

$$\lambda_1 = \frac{5.1 + \sqrt{5.1 - 4 \times 5.5}}{2} = \frac{5.1 + 2}{2} \doteq 3.5 > 1$$

因为 $\rho(B) \doteq 3.5 > 1$，故对简单迭代法是发散的。而对采德尔迭代法却是收敛的，因为

$$\boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} 5 & -5 \\ 1 & 0.1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 5 & -5 \\ 0 & 0.1 \end{bmatrix} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{U}$$

故采德尔迭代矩阵为

$$\boldsymbol{G} = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{U} = \begin{bmatrix} 5 & -5 \\ 5 & -4.9 \end{bmatrix}$$

因为

$$|\lambda \boldsymbol{I} - \boldsymbol{G}| = \begin{vmatrix} \lambda - 5 & 5 \\ -5 & \lambda + 4.9 \end{vmatrix} = \lambda^2 - 0.1\lambda + 0.5$$

模最大特征值

$$\lambda_1 = \frac{0.1 + \sqrt{(0.1)^2 - 4 \times 0.5}}{2} = \frac{0.1 + \sqrt{-1.99}}{2}$$

所以 $\rho((\boldsymbol{I} - \boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{U}) < 1$，故对采德尔迭代法是收敛的。

例 2　设迭代矩阵

$$\boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} 2.3 & -5 \\ 1 & -2.3 \end{bmatrix}$$

用简单迭代法收敛，而采德尔迭代法发散。此题作为练习，请读者自行完成。

3　定理 2 的证明中有不等式

$$\frac{\|\boldsymbol{B}\|_\infty - \beta_i}{1 - \beta_i} \leqslant \|\boldsymbol{B}\|_\infty$$

这是因为

$$\frac{\|\boldsymbol{B}\|_\infty - \beta_i}{1 - \beta_i} = \frac{\|\boldsymbol{B}\|_\infty - \|\boldsymbol{B}\|_\infty \beta_i - \beta_i + \|\boldsymbol{B}\|_\infty \beta_i}{1 - \beta_i}$$

$$= \frac{\|\boldsymbol{B}\|_\infty (1 - \beta_i) - (1 - \|\boldsymbol{B}\|_\infty)\beta_i}{1 - \beta_i}$$

$$= \|B\|_\infty - \frac{1 - \|B\|_\infty}{1-\beta_i}\beta_i$$

$$\leqslant \|B\|_\infty$$

其中 $$\frac{1-\|B\|_\infty}{1-\beta_i} > 0$$

4　在定理 6 的证明中，用到了复数的知识，及线性代数酉空间的内积，如

（1）z_1, z_2为复数，$\overline{z}_1$，$\overline{z}_2$分别为其共轭复数，则

$$\overline{z_1 z_2} = \overline{z}_1 \overline{z}_2$$

$$\overline{z_1 + z_2} = \overline{z}_1 + \overline{z}_2$$

（2）x、y为任一复 n 维向量，则内积 $(x, y) = \overline{(y, x)}$

§10　共轭斜量法

1　A—共轭的由来

一个熟知的事实是，在二维空间中求 $f(x) = (Ax, x) - 2(b, x)$的极小问题，就是求椭圆族的中心x^*。如下图。另外过 x^* 的任一条直线与诸椭圆交点处的切线互相平行，根据这一事实，如果在两个互相平行的直线s_0上，分别求出二次函数的极小点$x_0, \overline{x_0}$，它必为椭圆族中某两椭圆与此两直线的切点，并且此两点联线s_1必通过该椭圆中心 x^*，而s_1，s_0有关系式

$$(As_1, s_0) = 0$$

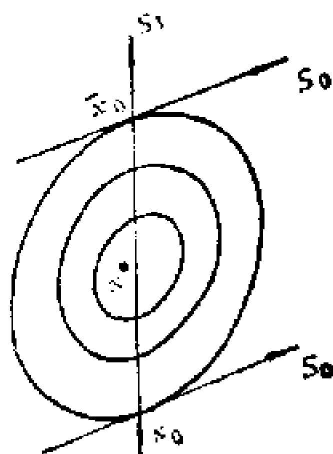


图 3・2

这是因为，任取一点$x_0 \in R^{(2)}$沿给定方向 s_0 求α_0，使得 $f(x_0 + \alpha s_0)$ 达到极小。即

$$(Ax_0 - b, s_0) = (r_0, s_0) = 0$$

同样由$\overline{x_0}$沿给定方向 s_0，求 $\overline{\alpha_0}$，使得 $f(\overline{x_0}+\overline{\alpha}\ s_0)$达到极小，即

$$(A\overline{x_0}-b,\ s_0)=(\overline{r_0},\ s_0)=0$$

于是有

$$(\overline{r_0},\ s_0)-(r_0,\ s_0)=(\overline{r_0}-r_0,\ s_0)$$

$$=(A(\overline{x_0}-x_0),\ s_0)=(As_1,\ s_0)=0$$

满足这种关系的 s_0，s_1称为A—共轭。

2 （10.17）的形成，是从 $r_0=s_1$ 出发，逐次修正向量$s_k(k=1,2,\cdots,n-1)$形成一个共轭向量组，即满足关系式

$$(As_i,\ s_j)=0\quad(i\neq j)$$

逐次残向量$r_k(k=0,1,2,\cdots,n-1)$形成一个正交向量组

$(r_i,r_j)=0\quad(i\neq j)$，最后得

$$x^*=x_0+\alpha_0 s_0+\alpha_1 s_1+\cdots+\alpha_{n-1}s_{n-1}$$

3 定理2（1）、（2）、（3）在书中已论证，为了便于读者自学，在此将性质（4），（5）用数学归纳法证明如下：

当 $k=1$时，有

$$r_1=r_0-\alpha_0 As_0$$

因为 $s_0=r_0$，所以

$$r_1=r_0-\alpha_0 As_0=(I-\alpha_0 A)r_0=g_1(A)r_0$$

其中 $g_1(A)=I-\alpha_0 A$

$$s_1=r_1+\beta_0 s_0=(I-\alpha_0 A)r_0+\beta_0 r_0$$

$$=((I-\beta_0)I-\alpha_0 A)r_0=f_1(A)r_0$$

其中 $f_1(A)=I+\beta_0 I-\alpha_0 A$。即当 $k=1$时，（4）、（5）都成立。

假设 $r_{k-1}=g_{k-1}(A)r_0$，$s_{k-1}=f_{k-1}(A)r_0$

其中 $g_{k-1}(A)$，$f_{k-1}(A)$为$k-1$次多项式，则

$$r_k=r_{k-1}-\alpha_{k-1}As_{k-1}$$

$$=g_{k-1}(A)r_0-\alpha_{k-1}Af_{k-1}(A)r_0$$

$$=[g_{k-1}(A)-\alpha_{k-1}Af_{k-1}(A)]r_0$$
$$=g_k(A)r_0$$

其中 $g_k(A)=g_{k-1}(A)-\alpha_{k-1}Af_{k-1}(A)$，显然为 k 次多项式。

$$s_k=r_k+\beta_k s_{k-1}$$
$$=g_k(A)r_0+\beta_k f_{k-1}(A)r_0$$
$$=[g_k(A)+\beta_k f_{k-1}(A)]r_0$$
$$=f_k(A)r_0$$

其中 $f_k(A)=g_k(A)+\beta_k f_{k-1}(A)$，显然为 k 次多项式。证完。

§11 求矩阵特征值的幂方法

1 求矩阵特征值，特征向量的方法也分为两类，一是精确法，二是迭代法。本节介绍的求按模最大的特征值及其相应特征向量的乘幂法，这是一种迭代法。

2 三种情况的区分

为了帮助读者更好的理解，在此对三种情况举实例加以说明。

第Ⅰ种情况，如书中之例，从迭代向量的分量的数值变化发现是单调的，有规律性的，基本满足关系式

$$x_i^{(k+1)}/x_i^{(k)}\doteq x_i^{(k)}/x_i^{(k-1)}\doteq x_i^{(k-1)}/x_i^{(k-2)},$$
$$i=1,2,\cdots,n$$

第Ⅱ种情况，分量的变化规律不一定是单调的，但也有规律性，基本上满足关系式

$$x_i^{(k+2)}/x_i^{(k)}\doteq x_i^{(k+1)}/x_i^{(k-1)}\doteq x_i^{(k)}/x_i^{(k-2)},(i=1,2\cdots,n)$$

如求 $A=\begin{bmatrix}-1 & 2\\ 1 & 1\end{bmatrix}$ 的特征值.

解 任取 $x_0=(-1,\ 0)^T$，和 $x_0=(-1,\ 2)^T$

列表计算如下：

	-1	2
	1	1
$\mathbf{X}_0$	-1	0
$\mathbf{X}_1$	1	-1
$\mathbf{X}_2$	-3	0
$\mathbf{X}_3$	3	-3
$\mathbf{X}_4$	-9	0
$\mathbf{X}_5$	9	-9
$\dfrac{x_i^{(5)}}{x_i^{(3)}}$	3	3

	-1	2
	1	1
$\mathbf{X}_0$	-1	2
$\mathbf{X}_1$	5	1
$\mathbf{X}_2$	-3	6
$\mathbf{X}_3$	15	3
$\dfrac{x_i^{(3)}}{x_i^{(1)}}$	3	3

从上面两表中可以发现各分量变化虽然不单调，但有规律性，即

$$\frac{x^{(5)}}{x^{(3)}}=\frac{x^{(3)}}{x^{(1)}}=3\text{，和}\quad \frac{x^{(3)}}{x^{(1)}}=\frac{x^{(2)}}{x^{(0)}}=3$$

故知属于第 Ⅱ 种情况，得

$$\lambda_1^2=3$$

所以

$$\lambda_1=\sqrt{3}\,,\qquad \lambda_2=-\sqrt{3}$$

并且还可看出初始值x_0的选取，对迭代步骤是有影响的，当取 $x_0=(-1,0)^T$ 时，需迭代五步发现规律性，若取 $x_0=(-1,2)^T$ 时，只迭代三步就可以发现分量的变化规律，所以取初始向量x_0对敛速是有影响的，但还没有好的办法来选取x_0，全靠经验。

第 Ⅲ 种情况，计算各分量很不规则，不论是符号或是分量的绝对值，变动都很大，即可断定属于第三种情况，即特征值

为复数。

例 求 $B=\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$ 的特征值.

解 取 $x_0=(1,\ 0)^T$，列表计算如下：

	1	2
	-1	1
X_0	1	0
X_1	1	-1
X_2	-1	-2
X_3	-5	-1
X_4	-7	4
X_5	1	11
X_6	23	10

从表中发现各分量的变化规律很不规则，属于第Ⅱ种情况。令 $\lambda=a+b_i$，取

$$x_4=(-7,-4)^T,\ x_5=(1,11)^T,\ x_6=(23,10)^T$$

的分量代入公式（11，14）

$$x_i^{(k-2)}-2ax_i^{(k+1)}+(a^2+b^2)x_i^{(k)}=0 \quad (i=1,2)$$

中，得

$$\begin{cases} 23-2a\cdot 1+(a^2+b^2)(-7)=0 \\ 10-2a\cdot 11+(a^2+b^2)\ \times 4=0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} 23-2a-7(a^2+b^2)=0 & (1) \\ 10-22a+4(a^2+b^2)=0 & (2) \end{cases}$$

解此方程组得

$$a^2+b^2=3$$

代入（1）中，得 $a=1$，从而 $b=\pm\sqrt{2}$，所以

$$\lambda_1 = 1 + \sqrt{2}\, i,\quad \lambda_2 = 1 - \sqrt{2}\, i$$

3　内积加快法

内积加快法是用于求实对称矩阵模最大特征值 λ（λ 为实数）的加快方法，但要注意，属于乘幂法中的第Ⅰ种情况，应用加快公式

$$\lambda_1 = \frac{(\boldsymbol{x}_k,\ \boldsymbol{x}_k)}{(\boldsymbol{x}_k,\ \boldsymbol{x}_{k-1})} \tag{12.16}$$

属于第Ⅱ种情况，应用加快公式

$$\lambda_1^2 = \frac{(\boldsymbol{x}_k,\ \boldsymbol{x}_k)}{(\boldsymbol{x}_{k-1},\ \boldsymbol{x}_{k-1})} \tag{12.17}$$

可以指出，对非对称实矩阵也可以用内积加快公式，但要作出一个向量序列 $\{\boldsymbol{y}_k\}$，其中

$$\boldsymbol{y}_k = \boldsymbol{A}^T \boldsymbol{y}_{k-1}$$

$\boldsymbol{A}^T$为A的转置，那末就有

$$\lambda_1 = \frac{(\boldsymbol{x}_k,\ \boldsymbol{y}_k)}{(\boldsymbol{x}_k,\ \boldsymbol{y}_{k-1})}$$

或

$$\lambda_1^2 = \frac{(\boldsymbol{x}_k,\ \boldsymbol{y}_k)}{(\boldsymbol{x}_{k-1},\ \boldsymbol{y}_{k-1})}$$

详见本节习题第 6 题之解。

4　反幂法

反幂法又称反迭代法，它可以用来计算非奇异阵A的按模最小（$\neq 0$）的特征值和相应的特征向量。

因为

$$A\boldsymbol{x} = \lambda_1 \boldsymbol{x}$$

所以对上式两边用$\frac{1}{\lambda_1}A^{-1}$乘之，得

$$A^{-1}\boldsymbol{x} = \frac{1}{\lambda_1}\boldsymbol{x}$$

所以A的模最大特征值的倒数就是 A^{-1}模最小特征值，A的模

最小特征值的倒数是 A^{-1} 的模最大特征值。从而，若求 A 的模最小的特征值等价于求 A^{-1} 模最大的特征值。按幂法作迭代

$$x_{k+1}=A^{-1}x_k$$

求 $\frac{1}{\lambda_n}$，但在实际计算时，由于 A^{-1} 是未知的，需要求 A^{-1}，这是很麻烦的，于是变形为

$$Ax_{k+1}=x_k$$

这是一个已知 x_k，求解方程组得 x_{k+1}，称此法为反迭代法，这种方法并不简单，实际计算可按（11.20）进行。

5　下面介绍一个用幂法求 A 的最小特征值的方法。

设阵 A 的特征值满足

$$\lambda_1\geqslant\lambda_2\geqslant\cdots\geqslant\lambda_n>0$$

其中 λ_1 用幂法已求出，为求 λ_n，取 $\mu>\lambda_1$，作

$$\overline{B}=\mu I-A$$

因为

$$\begin{aligned}\overline{B}x_i&=(\mu I-A)x_i=\mu x_i-Ax_i\\&=(\mu-\lambda_i)x_i\end{aligned}$$

由于

$$\begin{aligned}\overline{B}x_i&=(\mu I-A)x_i\\&=(\mu-\lambda_i)x_i,\qquad i=1,2\cdots,n\end{aligned}$$

所以 $\overline{B}$ 的特征值为 $\mu-\lambda_i$。因阵 A 的特征值

$$\lambda_1\geqslant\lambda_2\geqslant\cdots\geqslant\lambda_n>0$$

所以阵 $\overline{B}$ 的特征值满足

$$\mu-\lambda_1\leqslant\mu-\lambda_2\leqslant\cdots\leqslant\mu-\lambda_n$$

若令 $\mu-\lambda_n=c_1$，则 $\overline{B}x=c_1x$，　$(\mu I-A)x=cx=(\mu-\lambda_n)x$

所以

$$\lambda_n=\mu-c_1$$

这就告诉我们，若求阵 A 的最小特征值，它等价于求阵 $\overline{B}=\mu I-A$ 的最大特征值 c_1，这就解决了求阵 A 的最小特征值

λ_n的问题。

6　解题步骤

（1）取初始向量x_0。

（2）列表进行计算。

（3）根据分量变化规律性，确定属于哪种情况，便可确定模最大特征值和相应的特征向量。

§12　求实对称矩阵的特征值的二分法

1　施特姆(sturm)序列的一般定义

定义在闭区间$[a,b]$上的实函数序列

$$p_0(x),\ p_1(x),\ \cdots,\ p_n(x)$$

总满足如下条件，则称此序列为一个施特姆序列：

1°　$p_i(x)$　$(i=0,1,2\cdots,n)$均是连续函数。

2°　函数$p_0(x)$在区间$[a,b]$上不变号。

3°　序列中任何两个相邻函数在$[a,b]$内无公共零点。

4°　若函数$p_i(x)(i=1,2,\cdots,n-1)$在区间$[a,b]$内某点处为零，则相邻两个函数　$p_{i+1}(x)$，$p_{i-1}(x)$，在该点处符号相反。

5°　$p_i(x)$的根全是单重的，并且$p_i(x)$的根把$p_{i+1}(x)$的根严格的隔离开来($1\leqslant i\leqslant n$)。

(12,2)　定义的序列满足以上5条，是一个施特姆序列。

2　求矩阵

$$B=\begin{pmatrix}-2 & 1 & & \\ 1 & -2 & 1 & \\ & 1 & -2 & 1\\ & & 1 & -2\end{pmatrix}$$

在区间$[-2,0]$内特征值的个数。

解　首先计算$S(0)$及$S(-2)$。令$\lambda=0$时，有$p_0(0)=1$

$p_1(0)=-2$

$p_2(0)=(-2)(-2)-1=3$

$p_3(0)=(-2)\cdot 3-1\cdot(-2)=-4$

$p_4(0)=(-2)(-4)-1\cdot 3=5$

由于序列$\{p_i(0)\}$的符号是正负交替的，任何相邻两数的符号皆不相同，所以$S(0)=0$。

令 $\lambda=-2$时，则有

$p_0(-2)=1$

$p_1(-2)=-2+2=0$

$p_2(-2)=0-1=-1$

$p_3(-2)=0-0=0$

$p_4(-2)=0+1=1$

符号序列确定为 $++--+$ ，有两个相邻的符号相同，故$S(-2)=2$。由定理1知

$$S(-2)-S(0)=2-0=2$$

即B在$[-2,\ 0]$内有两个特征值。

3 求实对称三对角阵的特征值的区间二分法。其优点在于可求出某一区间特征值，因为它可以应用施特姆序列的性质按定理1很快选出一个只含有一个特征值λ的区间$[\alpha,\ \beta]$，取 $c=\frac{1}{2}(\alpha+\beta)$，然后计算$S(\alpha)-S(c)$，$S(c)-S(\beta)$，其中必有一个为0，一个为1，进一步确定根的存在区间，反复用这一方法，便可求出满足任意精度的特征值λ。

4 对(12,7)的证明

设 $\boldsymbol{x}\in R^n$ 为任一非零向量，向量$\boldsymbol{y}$为$\boldsymbol{x}$关于过原点0的平面π的镜像。

则

$$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{x}-2(\boldsymbol{u}^T\boldsymbol{x})\boldsymbol{u}$$

其中 $\boldsymbol{u}$为平面π的单位法向量，即$\|\boldsymbol{u}\|=1$

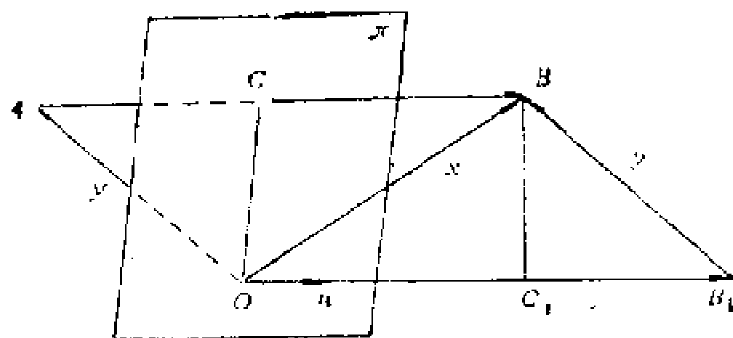


图 3·3

证明 根据向量的三角形法则知

$$x - y = \overrightarrow{AB} = 2\overrightarrow{AC} = 2\overrightarrow{OC_1}$$

其中 $2\overrightarrow{OC_1}$ 与u共线，于是$\overrightarrow{OC_1}$ 可写成

$$u^T x u = (u^T x) u = \overrightarrow{OC_1}$$

这是因为 $u^T x$ 是内积(u, x)，从而 $u^T x$ 是一个数，所以$(u^T x) u$ 是x在u上的射影，即

$$y = x - 2(u^T x) u$$

5 例 将矩阵

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

三对角化.

解 因为 $b_1 = (1,2,1,2)^T$

$$\sigma_1 = \left(\sum_{i=2}^{4} a_{i1}^2\right)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{2^2 + 1^2 + 2^2} = 3$$

由 (12,14) 得 $\overline{\omega_1} = (0, 2+3, 1, 2)^T$,

$$\alpha_1 = \frac{1}{\sigma_1^2 + |a_{21}|\sigma_1} = \frac{1}{3^2 + 6} = \frac{1}{15}$$

由 (12,15) 得

$$p_1 = a_1 A_1 \overline{\omega_1} = \frac{1}{15}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 5 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 11/15 \\ -2/15 \\ 8/15 \end{pmatrix}$$

$$\doteq (1, 0.73, -0.13, 0.53)^T$$

$$k_1 = \frac{1}{2} a_1 \overline{\omega_1}^T p_1 = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{15}(0, 5, 1, 2)\begin{pmatrix} 1 \\ 0.73 \\ -0.13 \\ 0.53 \end{pmatrix} \doteq 0.15$$

$$q_1 = p_1 - k_1 \overline{\omega_1} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0.73 \\ -0.13 \\ 0.53 \end{pmatrix} - 0.15\begin{pmatrix} 0 \\ 5 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -0.02 \\ -0.28 \\ 0.23 \end{pmatrix}$$

$$\overline{\omega_1} q_1^T = \begin{pmatrix} 0 \\ 5 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}(1, -0.02, -0.28, 0.23)$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 5 & -0.1 & -1.4 & 1.15 \\ 1 & -0.02 & -0.28 & 0.23 \\ 2 & -0.04 & -0.56 & 0.46 \end{pmatrix}$$

$$q_1 \overline{\omega_1}^T = \begin{pmatrix} 1 \\ -0.02 \\ -0.28 \\ 0.23 \end{pmatrix}(0、5、1、2)$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & 5 & 1 & 2 \\ 0 & -0.1 & -0.02 & -0.04 \\ 0 & -1.4 & -0.28 & -0.56 \\ 0 & 1.15 & 0.23 & 0.46 \end{pmatrix}$$

所以

$$\overline{\omega_1}q_1^T+q_1\overline{\omega_1}^T=\begin{pmatrix}0 & 5 & 1 & 2\\ 5 & -0.2 & -1.42 & 1.11\\ 1 & -1.42 & -0.56 & -0.33\\ 2 & 1.11 & -0.33 & 0.92\end{pmatrix}$$

由(12.16)得

$$A_2=A_1-(\overline{\omega_1}q_1^T+q_1\overline{\omega_1}^T)$$

$$=\begin{pmatrix}1 & 2 & 1 & 2\\ 2 & 2 & -1 & 1\\ 1 & -1 & 1 & 1\\ 2 & 1 & 1 & 1\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}0 & 5 & 1 & 2\\ 5 & -0.2 & -1.42 & 1.11\\ 1 & -1.42 & -0.56 & -0.33\\ 2 & 1.11 & -0.33 & 0.92\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}1 & -3 & 0 & 0\\ -3 & 2.2 & 0.42 & -0.11\\ 0 & 0.42 & 1.56 & 1.33\\ 0 & -0.11 & 1.33 & 0.08\end{pmatrix}$$

其次求A_3

$$b_2=(-3,2.2,0.42,-0.11)^T$$

$$\sigma_2=(\sum_{i=3}^{4}a_{i2}^2)^{\frac{1}{2}}=\sqrt{(0.4)^2+(-0.15)^2}=0.43$$

$$\overline{\omega_2}=(0,0,0.4+0.43,-0.11)^T=(0,0,0.83,-0.11)^T$$

$$\alpha_2=\frac{1}{\sigma_2^2+|a_{32}|\sigma_2}=\frac{1}{(0.43)^2+0.42\times0.43}=2.74$$

$$p_2=\alpha_2A_2\overline{\omega_2}=2.74\begin{pmatrix}1 & -3 & 0 & 0\\ -3 & 2.2 & 0.42 & -0.11\\ 0 & 0.42 & 1.56 & 1.33\\ 0 & -0.11 & 1.33 & 0.08\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\0\\0.83\\-0.11\end{pmatrix}$$

$$=2.74\begin{pmatrix}0\\0.36\\1.15\\1.10\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\0.99\\3.15\\3.0\end{pmatrix}=(0,0.99,3.15,3.0)^T$$

$$k_2=\frac{1}{2}\alpha_2\overline{\omega}_2{}^T p_2=0.5\times 2.74(0,0,0.83,-0.11)\begin{pmatrix}0\\0.99\\3.15\\3.0\end{pmatrix}$$

$$=3.13$$

$$q_2=p_2-k_2\overline{\omega_2}=\begin{pmatrix}0\\0.99\\3.15\\3.0\end{pmatrix}-3.13\begin{pmatrix}0\\0\\0.83\\-0.11\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\0.99\\0.55\\3.34\end{pmatrix}$$

$$\overline{\omega_2}q_2^T=\begin{pmatrix}0\\0\\0.83\\-0.11\end{pmatrix}(0,0.99,0.55,3.34)$$

$$=\begin{pmatrix}0&0&0&0\\0&0&0&0\\0&0.82&0.46&2.77\\0&-0.11&-0.06&-0.37\end{pmatrix}$$

$$q_2\overline{\omega_2}{}^T=\begin{pmatrix}0\\0.99\\0.55\\3.34\end{pmatrix}(0,\ 0,\ 0.83,\ -0.11)$$

$$=\begin{pmatrix}0&0&0&0\\0&0&0.82&-0.11\\0&0&0.46&-0.06\\0&0&2.27&-0.37\end{pmatrix}$$

因为

$$\overline{\omega}_2q_2{}^T+q_2\overline{\omega}_2{}^T=\begin{pmatrix}0&0&0&0\\0&0&0.82&-0.11\\0&0.82&0.92&2.71\\0&-0.11&2.71&-0.74\end{pmatrix}$$

所以

$$A_3 = A_2 - (\omega_2 q_2^T + q_2 \omega_2^T)$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & -3 & 0 & 0 \\ -3 & 2.2 & 0.42 & -0.11 \\ 0 & 0.42 & 1.56 & 1.33 \\ 0 & -0.11 & 1.33 & 0.08 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.82 & -0.11 \\ 0 & 0.82 & 0.92 & 2.71 \\ 0 & -0.11 & 2.71 & -0.74 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & -3 & 0 & 0 \\ -3 & 2.2 & -0.40 & 0 \\ 0 & -0.40 & 0.64 & -1.38 \\ 0 & 0 & -1.38 & 0.82 \end{pmatrix}$$

§13 QR 方法

1　QR 方法是一种迭代法，它是同时求实矩阵 A的全部特征值的方法，而前几节讲述的方法，一个迭代过程只能求一个特征值.

2　定理 1 是 QR方法能够实现的基础，即存在正交矩阵 Q^{-1} 使

$$Q^{-1}A = R$$

其中 R为上三角形矩阵，则有

$$A = QR$$

然后将Q, R交换相乘得出矩阵

$$A_1 = RQ = Q^{-1}AQ$$

这样就完成了QR方法一步计算．且A与A_1 正交相似，它们有相同的特征值．它的迭代过程就是（13.2）、（13.3）：

$$A_k = Q_k R_k$$

$$A_{k+1} = R_k Q_k$$

此处的正交阵是§3.12中讲的初等反射阵。

在一定条件下可以证明 A_{k+1} 收敛于上三角形阵，其对角元即为所求全部特征值。

3　定理 2 证明了 A_{k+1} 基本收敛于一个上三角形阵，这儿用的"基本"两个字是因为 A_{k+1} 的上非对角元素不能收敛于一个确定的值。但这无关大局，因为我们只要求上三角形阵的对角元有确定的值就够了。这些对角元就是A的特征值。我们称这种对角元有确定极限，非对角元是否有极限，都称方法是收敛的，为按型收敛或本质收敛。

4　引理 2，实际上是说明除 Q的列向量有个符号差别，R的行向量有个符号差别外，分解 $A=QR$ 是唯一的。如果假定R的对角元为正，则A的 QR 分解就是唯一的。证明与引理 2 的证明类似。

这里所用到的知识是正交矩阵的性质，上三角形矩阵之积还是上三角形矩阵，一个对角阵的逆是它本身，那么该阵的对角元素只能是 1 或 -1，至于证明请读者自己去进行吧。

本节中的几个引理都是为证定理 2 作准备的，即把定理 2 的证明分散为几个问题来进行的，这样做主要是为了分散难点。

5　定理 2 是给出了序列 $A_1, A_2, \cdots, A_k, \cdots$ 收敛的一个充分条件，这些条件是非常刻苛的，如要求实矩阵A_1（即A）与对角阵相似，这只有A的初等因子为一次的才可以。如对称阵是其中之一，一般来讲是很难判别的。

其次要求A的特征值的模都不相等，且不等于 0 （A 非奇异），这也是不好确定的。

第三还要求相似变换的变换阵X的逆X^{-1}有LR 分解，这在第三章§ 3 矩阵的三角分解中已知，一个可逆矩阵的 LR分解并不永远可实现的。

所以定理 2 中的条件一般来讲是不好验证的．初学者可以不读这一定理的证明．

对于对称阵用 QR方法求特征值，其敛速是很高的，且已证明它可有 3 阶敛速．所以目前 QR方法是很受欢迎的有效方法之一．

这个方法的缺点是运算量很大，不用电子计算机是很难进行的．

6 对一般实矩阵来讲 A_{k+1} 收敛于一个拟上三角阵，即一个分块上三角阵

$$R=\begin{pmatrix} B_{11} & B_{12}\cdots B_{1s} \\ & B_{22}\cdots B_{2s} \\ & \ddots \quad \vdots \\ 0 & B_{ss} \end{pmatrix}$$

其中 B_{ii}是 1 阶或 2 阶块，1 阶块就是A的特征值，2 阶块就是对应A的一对共轭复数特征值．例如

$$A=\begin{pmatrix} 5 & -2 & -5 & -1 \\ 1 & 0 & -3 & 2 \\ 0 & 2 & 2 & -3 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

用 QR法可变为

$$B=\left(\begin{array}{c|cc|c} 4.0000 & 5.0484 & -3.6564 & * \\ \hline 0 & 1.8789 & -3.5910 & * \\ 0 & 1.3290 & 0.1211 & * \\ \hline 0 & 0 & 0 & -1.0000 \end{array}\right)$$

（* 代表一个数略去缩写）B的特征值有 4.0000 及 -1.0000．

另外两个特征值是

$$\begin{vmatrix} \lambda-1.8787 & +3.5910 \\ -1.3290 & \lambda-0.1211 \end{vmatrix}=0$$

的根 $1+2i$，$1-2i$，即B的特征值。这四个特征值也是A的特征值。

对这种一般矩阵的 QR方法的收敛性定理另有论述，读者可见有关专门论述求矩阵特征值的著作。

7　习题中，第 4 题的内容是给出一个求A的全部特征值的另一方法，叫LR 方法。此法是 QR方法的先导，它也收敛于一个上三角阵。证明方法与定理 2 类似，不过LR 方法数值稳定性差，一般不用。

与QR方法相对应的还有LQ方法（L为下三角阵），其基本思想与 迭代过程与QR方法类似，不过它收敛于一个下三角阵。

四　复习思考题

1　用全主元消元法解方程组

$$\begin{pmatrix} 2 & 6 & -1 \\ 5 & -1 & 2 \\ -3 & -4 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 11 \\ 9 \\ -8 \end{pmatrix}$$

2　改进平方根法是否唯一，并举例说明之。

3　试证方程组$Ax=b$，列主元强对角占优，即

$\sum\limits_{\substack{i=1\\ i\neq j}}^{n}|a_{ij}|<a_{jj}$，则采德尔迭代法

$$x_{n+1}=x_n-D^{-1}[Ex_{n+1}+(D+F)x_n]+D^{-1}b$$

收敛，其中D为对角阵，E 为严格下三角阵，F 为严格上三角阵。

4　求阵A的最大特征值λ，及相应的特征向量，准确到10^{-4}。

$$A=\begin{pmatrix} 3 & 1 & -3 \\ -4 & -2 & 6 \\ -1 & -1 & 5 \end{pmatrix}$$

5　用二分法求阵A：

$$A=\begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

的最大特征值。

五　本 章 小 结

为了更好掌握本章内容，归纳整理如下：

1　解线性方程组的精确法

消元法 $\begin{cases} \text{高斯消元法} \\ \text{列主元消元法} \\ \text{全主元消元法} \end{cases}$

改进平方根法

追赶法（适用于三带阵）

共轭斜量法（适用于对称正定阵）

用消元法求逆

加边求逆法

2　解线性方程组的迭代方法

简单迭代法；点雅可比法

采德尔迭代法；点高斯采德尔迭代法

最速下降法

3　求特征值及特征向量的迭代法

求最大特征值的幂方法

求实对称阵任一特征值的二分法

求全部特征值的QR 方法

第四章　插值与逼近学习指导

一、主 要 内 容

本章主要介绍求函数 $f(x)$ 的近似函数 $y(x)$ 的两种方法：插值法、最小平方逼近法。还根据需要介绍了如下概念：差商、差分、正交多项式及它们的性质。

二、基 本 要 求

通过本章学习，能够利用插值法、平方逼近法去构造符合要求的近似函数，或计算出某函数的近似函数值．并能用本章理论去解释一般数学用表的构造原理，去推导某些经验公式及解矛盾方程组等问题．

它是数值微分、数值积分、常微分方程数值解等内容的理论基础。

1　能按所给的具体要求，选用适当的近似公式，求出近似函数或计算出函数的近似值，并估计其误差．

2　掌握插值与平方逼近的基本思想，去构造符合要求的近似函数．

3　应用本章理论去解释数学用表的构造；求导数的近似值；求方程的近似根；求矛盾方程组的解及导出经验公式等问题．

4　应用差分性质证明一些初等数学公式．

另外，学习本章时，应注意以下几点：

1　注意掌握插值法与平方逼近法的异同点．

2　注意各种方法的推导过程（基本思想）、误差程度、使用条件及应用范围。

3　待定系数法在本章占有重要地位，应给予必要的重视。

三　内容分析

§1　引　　言

1　弄清插值与平方逼近的定义及区别。设

$$R(x)=f(x)-y(x)$$

插值逼近是使

$$R(x_i)=0,\quad i=0,1,2,\cdots,n$$

即要求 $y(x)$ 通过已知点 $(x_i, y_i), i=0,1,2,\cdots,n$。

最小二乘法及平方逼近是使

$$\sum_{i=0}^{n}[f(x_i)-y(x_i)]^2 \text{ 及} \int_a^b \rho(x)R^2(x)dx$$

为最小，即不要求 $y(x)$ 通过所有已知点，只要求它与已知点（或函数）的偏差平方和（或积分）为最小。

2　求逼近函数的两个具体例子。

例1　为修水坝，预算土方量，必须知道河床某横断面的河床曲线，但实际上仅能测得横断面处若干处的河深。把该问题变成数学问题，就是：

已知函数表

x	x_1	x_2	x_3	$\cdots$	x_n
y	y_1	y_2	y_3	$\cdots$	y_n

其中 x_i 表示测点，y_i 表示在测点 x_i 处的河深，求其河床曲线。

此问题就是一个插值逼近问题，因为准确的河床曲线求不

出，只能通过观测数据，求其近似河床曲线。

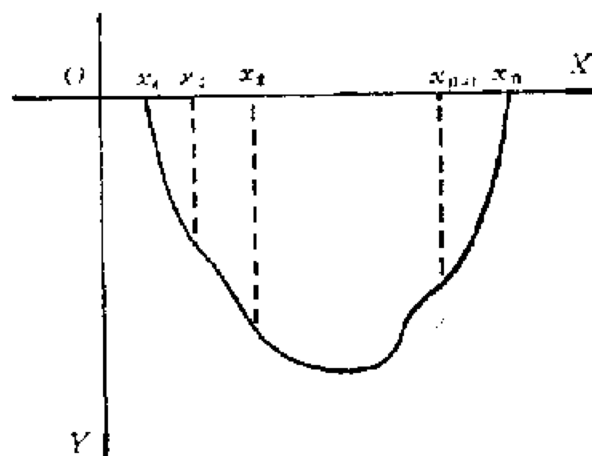


图4.1

例 2　观测一个物体的直线运动，得以下数据：

时间 t （秒）	0.0	0.9	1.9	3.0	3.9	5.0
距离 S （米）	0.0	10	30	50	80	110

求此物体的运动方程。因为它是非匀速直线运动，所以其运动方程为

$$S = V_0 t + \frac{1}{2} a t^2$$

如果能确定出 V_0 及 a ，则此物体的运动方程便算求得.为此，我们把此问题看成曲线拟合问题，按最小二乘法，来求出适合已知数据的 V_0 、 a 的近似值，从而，求出其近似运动方程。

§ 2　线性插值与抛物插值

1　注意插值多项式的书写形式。同一插值问题，为了应用需要，可以写成不同形式，如不考虑舍入误差时，实质上，是一样的，例如线性插值有三种形式。

（1）牛顿形式：

$$f_1(x)=f(x_0)+f(x_0,x_1)(x-x_0)$$

其中 $f(x_0,x_1)=(y_1-y_0)/(x_1-x_0)$。

（2）拉格朗日形式（A）：

$$L_1(x)=l_0(x)y_0+l_1(x)y_1$$

其中 $l_0(x)=(x-x_1)/(x_0-x_1)$，$l_1(x)=(x-x_0)/(x_1-x_0)$。

（3）拉格朗日形式（B）：

$$L_1(x)=l_0(x-x_1)+l_1(x-x_0)$$

其中 $l_0=y_0/(x_0-x_1)$，$l_1=y_1/(x_1-x_0)$。但不考虑舍入误差时，$f_1(x)=L_1(x)$。

读者自己考虑抛物插值的三种形式的表达式。

还要注意到，从其中一种形式，可以推出其它形式。

2　一般数学用表，均是按四位数给出的。一般均用分段线性插值来构造修正项的。其修正项就是$t\Delta y_0$，其中 $t=(x-x_0)/h$，$\Delta y_0=y_1-y_0$，$h=x_1-x_0$，x 是插值点。

3　在使用线性插值解决实际问题时，一定要注意区间$[x_0,\ x_1]$不能太长，而且 $f(x)$ 在$[x_0,x_1]$上变化比较平稳时，才适用。若遇到$f(x)$在$[x_0,x_1]$上变化比较大且不平稳时，只要加密分点把区间缩小，分段插值就可以了，如图 4.2所示，这时用$\overline{AB_1}$ 代替 $\widehat{AB_1}$，就比较合适。

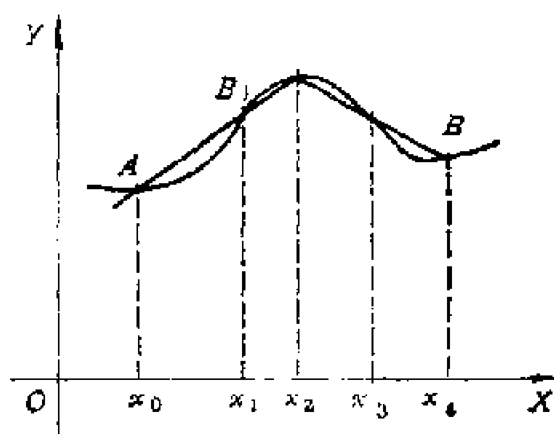


图4.2

4　例 3　已知正弦函数表

x	30°	30°6′
y	0.5000	0.5015

试求 f（30°2′）的值并估计该近似值的误差。

解　因为 $x_1-x_0=30°6'-30°=6'=0.001745$，$x=30°2'$，代入公式（2.1），得

$$f(30°2') \doteq f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}(y_1 - y_0)$$

$$= 0.5000 + \frac{2'}{6'}(0.0015) = 0.5005$$

由于

$$y = \sin x, \quad |y''| = |-\sin x| \leqslant 1$$

所以，由式$(3.5)_1$得

$$|R_1(x)| \leqslant \frac{1}{8}\left(\frac{\pi}{1800}\right)^2 < 0.0000004$$

而实际误差为

$$|\sin(30°2') - f(30°2')| = |0.50050374\cdots - 0.5005| < 0.0000038$$

一般认为，原始数据准确到四位小数，经线性插值后，也保持准确到四位小数。

5　由于初始节点用x_0表示，为此节点下角标与节点个数相差1，如x_2为第三个节点。

§3　拉格朗日插值公式

1　唯一性．它是指在不考虑舍入误差的情况下，满足插值条件

$$y(x_i) = f(x_i), \quad i = 0,1,2,\cdots,n \tag{1}$$

的插值多项式只有一个，而表示形式可以不同．

假设插值多项式为

$$y(x) = a_0x^n + a_1x^{n-1} + \cdots + a_n$$

如果能唯一确定其系数$a_i(i = 0,1,2,\cdots,n)$，则它就是唯一的．

由插值条件（1）得方程组

$$\begin{pmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 \cdots x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 \cdots x_1^n \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ 1 & x_n & x_n^2 \cdots x_n^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} \tag{2}$$

而方程组（2）的系数阵，由高等代数知，称为范德蒙（Vandermonde）行列式，当 $x_i \neq x_j$ 时，其行列式之值不等于零，所以方程组（2）有唯一解，即 $y(x)$ 是唯一的。

本书是用反证法来证明其唯一性的，也是证明唯一性的通用数学手段，读者务必掌握。

2　余项的推导．关键在于把余项 $R_n(f,x)$ 记成

$$R_n(f,x)=k(x)\omega(x)$$

即把余项表示成 $n+1$ 次式 $\omega(x)$ 与一个待定函数 $k(x)$ 的乘积的形式．它是根据余项的定义：

$$R_n(f,x)=f(x)-L_n(x)$$

由插值条件

$$L_n(x_i)=f(x_i)\qquad(i=0,1,2,\cdots,n)$$

即

$$R_n(f,x_i)=f(x_i)-L_n(x_i)=0\quad(i=0,1,\cdots,n)$$

从而知，$R_n(f,x)$ 含有 $n+1$ 个零点 $x_i(i=0,1,\cdots,n)$，又因为 $f(x)$ 为超越函数，（不一定是多项式，如是多项式，有可能其次数大于 $n+1$ 次），所以，其余项 $R_n(f,x)$ 也是超越函数．故它可以分解为

$$R_n(f,x)=k(x)\omega(x)$$

其中 $k(x)$ 为待定函数。

为了确定 $k(x)$，采用引入辅助函数办法．即设辅助函数

$$g(z)=f(z)-L_n(z)-k(x)\omega(z)$$

再反复利用中值定理，便可确定出 $k(x)$。

3　拉格朗日插值多项式

（1）　$n+1$ 个互不相同节点的拉格朗日插值多项式，是小于或等于 n 次多项式，是由 $n+1$ 项组成，也就是由 $n+1$ 个 n 次多项式的线性组合来组成的，而组合系数就是相应地函数值 y_i。即

$$L_n(x)=\sum_{i=0}^{n} l_i(x)y_i$$

（2）$n+1$ 个互不相同节点的拉格朗日插值多项式，可用于求位于$[a,b]$中任一点$\overline{x}$的函数近似值：

$$f(\overline{x})\doteq L_n(\overline{x})=\sum_{i=0}^{n} l_i(\overline{x})y_i$$

（3）当节点数变化时（仅变化一个），均须重新计算拉格朗日基本多项式，这是它的不方便的地方。

（4）当 $n=1, n=2$时，就是线性插值、抛物插值。

4　解题步骤（求近似多项式或函数近似值）

（1）根据已知数据，分别求出 $l_i(x)$（或$l_i(\overline{x})$）；

（2）代入公式$(3.8)_1$，经整理或计算，求得近似多项式 $L_n(x)$或函数近似值 $L_n(\overline{x})$。

5　应用插值法可求方程的近似根，它是一种实用的方法。特别是按反插值法求根，更是简单，但函数表必须满足严格单调的条件，否则就不能应用。我们仅举一反例来说明之。

例 4　已知连续函数 $p(x)$的函数表为

x	1	2	3
$p(x)$	-2	1	0.5

求方程 $p(x)=0$在$[1,3]$内的近似根。

如果我们不去分析所给函数表的特点如何，立即就用反插法去求其根，过程如下：

列反函数表

$p(x)$	-2	1	0.5
x	1	2	3

得反插多项式

$$L_2(p(x))=\frac{[p(x)-1][p(x)-0.5]}{(-2-1)(-2-0.5)}\times 1+$$

$$+\frac{[p(x)+2][p(x)-0.5]}{(1+2)(1-0.5)}\times 2$$

$$+\frac{[p(x)+2][p(x)-1]}{(0.5+2)(0.5-1)}\times 3$$

令 $p(x)=0$，则 $x^*\doteq L_2(0)\doteq 3.53$为所求得的根，但它在$[1,3]$的区间外，肯定是不对的。

为什么会出现这种现象呢？这是由于函数表不满足严格单调的条件所造成的。

因此，在利用反插法求根时，务必注意此要求。

§ 4　牛顿插值公式

1　非等距节点的牛顿插值公式，是从差商角度来建立插值问题的一种表达式，故也叫做差商型插值公式。当节点为等距时，用差分代替差商，便导出等距的牛顿插值多项式。

2　k 阶差商定义：

$k-1$ 阶差商的差商称为 k 阶差商。

$$f(x_i,x_{i+1},\cdots,x_{i+k})$$

$$=\frac{f(x_{i+1},x_{i+2},\cdots,x_{i+k})-f(x_i,\cdots,x_{i+k-1})}{x_{i+k}-x_i}$$

但此两个 $k-1$ 阶差商中，节点除一个节点不同外，其余节点一定要相同。例如：有差商 $f(x_0,x_1,x_2)$与$f(x_1,x_2,x_3)$，则有

$$\frac{f(x_1,x_2,x_3)-f(x_0,x_1,x_2)}{x_3-x_0}=f(x_0,x_1,x_2,x_3)$$

另外，还要注意：差商对不等距与等距节点均可适用．而差分，节点必须为等距时才适用。

3　k 阶差分：

$k-1$ 阶差分的差分称为 k 阶差分。即

$$\Delta^k y_i=\Delta^{k-1}y_{i+1}-\Delta^{k-1}y_i$$

或称为函数 $f(x)$ 在 x_i 上的 k 阶向前差分。除此之外，还有向后差分．把

$$\Delta y_i=y_i-y_{i-1}$$

称为函数 $f(x)$ 在 x_i 上的一阶向后差分。

$$\nabla^k y_i = \nabla^{k-1} y_i - \nabla^{k-1} y_{i-1}$$

称为k阶向后差分。

4　差商、差分及导数之间的关系是

$$f(x_0, x_1, \cdots, x_n) = \frac{\Delta^n y_0}{n! h^n} = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!} \qquad (1)$$

其中 ξ 为在由 $x_0, x_1, \cdots, x_i, \cdots, x_n$ 所确定的区间内之值。

假设 $f(x)$ 在$[x_0, x_n]$上有 n 阶连续导数存在，则由（1）得，当 $x_i \to x_0$时，

$$\lim_{x_i \to x_0} f(x_0, x_1, \cdots, x_n) = \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}$$

$$\lim_{h \to 0} \Delta^n y_0 = h^n f^{(n)}(x_0)$$

5　牛顿插值公式、前插与后插公式的应用范围。

如求近似多项式或近似函数值：当节点不等距时，选靠近插值点的部分节点，使用牛顿插值多项式。当节点为等距时，这要看插值点$\bar{x}$的位置。如当$\bar{x}$靠近表前时，应用前插多项式。当$\bar{x}$靠近表后时，最好采用后插多项式。这样可以提高近似值的精确度，因为此时的 $|\omega(\bar{x})|$比较小。若选全部节点时，应用那个公式所得结果都一样（不计舍入误差时）。

6　解题步骤

（1）按所给节点的间距特点（及$\bar{x}$的位置），选定恰当的插值多项式。

（2）按公式（4.6）或（4.11）或列表计算求出差商或差分，得到相应插值多项式的各项系数。

（3）代入相应插值多项式，整理简化，便得所求的近似多项式。若求某点$\bar{x}$之函数值则将$\bar{x}$，连同插值系数代入相应插值多项式中，便可计算出$f(\bar{x})$的近似值。

（4）估计误差（此步不可忽略）。

7　差分的误差传播

假设给定函数 $f(x)$ 的一组等距节点 $x_i = a + ih$ 的函数值：$y_i = f(a+ih)$ $(i=0,1,2,\cdots)$，且记为序列$\{y_i\}$。

如果在某一节点 x_k 处 y_k 发生了 ε 的误差，其它值无误差，则原序列$\{y_i\}$变成为

$$y_0, y_1, \cdots, y_{k-1}, y_k+\varepsilon, y_{k+1}, \cdots$$

将此序列记为 $\{\widetilde{y}_i\}$。我们研究误差序列

$$\varepsilon_i = \widetilde{y}_k - y_i = \begin{cases} 0 & i \neq k \\ \varepsilon & i = k \end{cases}$$

的高阶差分（假定中间过程不考虑舍入误差）。

列差分表如下：

i	ε_i	$\Delta\varepsilon_i$	$\Delta^2\varepsilon_i$	$\Delta^3\varepsilon_i$	$\Delta^4\varepsilon_i$	$\Delta^5\varepsilon_i$
⋮						
k	ε	ε	ε	ε	ε	ε
$k+1$		$-\varepsilon$	-2ε	-3ε	-4ε	-5ε
$k+2$			ε	3ε	6ε	10ε
$k+3$				$-\varepsilon$	-4ε	-10ε
$k+4$					ε	5ε
⋮						$-\varepsilon$

注：表中没有数的差分位置为零值。

从表中看到，误差随着差分阶的增高，不断扩大，其中$|\Delta^6\varepsilon_{k-3}| = 20\varepsilon$，因此，应尽量避免使用高阶差分。通常只使用到四、五阶差分。

8　利用差分性质求级数部分和

求级数部分和，主要用下面二个差分性质：

（1）习题 4.4 第11题：n 次多项式 $p(x)$的一阶差分是 $n-1$ 次多项式，它的 n 阶差分为常数，而 $n+1$ 阶差分等于零。

（2）习题 4.4 第12（2）题：某个节点的函数值，可以

用各阶差分进行线性表出。即

$$y_i = y_0 + C_i^1 \Delta y_0 + C_i^2 \Delta^2 y_0 + \cdots + \Delta^i y_0$$

例 5 求证

$$1^3 + 2^3 + \cdots + n^3 = \left[\frac{n(n+1)}{2}\right]^2 \tag{1}$$

证明 设函数 $g(x)$ 为

$$g(x) = 1^3 + 2^3 + \cdots + x^3 \tag{2}$$

则等式（1）的左边为

$$g(n) = 1^3 + 2^3 + \cdots + n^3$$

研究函数 $g(x)$ 的一阶差分，即

$$\Delta g(x) = g(x+1) - g(x) = (x+1)^3 \tag{3}$$

它是关于 x 的三次多项式。于是由性质（1）知，

$$\Delta^5 g(x) = 0, \quad \Delta^6 g(x) = 0, \cdots$$

为了能利用性质（2），令 $x_0 = 1, x_1 = 2, \cdots, x_{n-1} = n$，则

$$g(n) = g(x_{n-1}) = g_{n-1}$$

于是，由性质（2）知

$$\begin{aligned} g(n) &= g_0 + C_{n-1}^1 \Delta g_0 + C_{n-1}^2 \Delta^2 g_0 + \cdots + \Delta^{n-1} g_0 \\ &= g_0 + C_{n-1}^1 \Delta g_0 + C_{n-1}^2 \Delta^2 g_0 + C_{n-1}^3 \Delta^3 g_0 \\ &\quad + C_{n-1}^4 \Delta^4 g_0 \end{aligned} \tag{4}$$

其中 $\Delta^i g_0 (i = 1, 2, 3, 4)$ 可由差分表算出。

为此列差分表

x	$g(x)$	Δg_i	$\Delta^2 g_i$	$\Delta^3 g_i$	$\Delta^4 g_i$
1	$g(1)$				
2	$g(2)$	8			
3	$g(3)$	27	19		
4	$g(4)$	64	37	18	
5	$g(5)$	125	61	24	6

其中 Δg_i 是按（3）式计算的。从差分表中取相应差分值代入（4），得

$$g(n)=1+8C_{n-1}^{1}+19C_{n-1}^{2}+18C_{n-1}^{3}+6C_{n-1}^{4}$$

$$=1+8(n-1)+19\frac{(n-1)(n-2)}{2!}$$

$$+18\frac{(n-1)(n-2)(n-3)}{3!}+$$

$$+6\frac{(n-1)(n-2)(n-3)(n-4)}{4!}$$

再经过整理，便得

$$g(n)=\left(\frac{n(n+1)}{2}\right)^2$$

由此，证得等式（1）。

读者可以用这种办法，来证明

$$1^2+2^2+3^2+\cdots+n^2=\frac{1}{6}n(n+1)(2n+1)$$

$$1\cdot 2+2\cdot 3+\cdots+n(n-1)=\frac{1}{3}n(n+1)(n+2)$$

$$1\cdot 2\cdot 3+2\cdot 3\cdot 4+\cdots+n(n+1)(n+2)$$

$$=\frac{1}{4}n(n+1)(n+2)(n+3)$$

9 带重合节点的差商

在本书中所提的差商，对节点 $x_i(i=0,1,\cdots,n)$ 要求互不相同的。但是，往往不满足此要求，为此，必需引入带有重合节点的差商的定义。在这里仅通过实例说明其含义，不去严格地研究它。

如果 $f(x)$ 是足够连续可微函数，则各阶差商是其节点的连续可微函数。

例如二阶差商 $f(x_1,x_2,x_3)$，可以看成关于 x_1、x_2、x_3 的三元函数，且连续可微的，则

$$\frac{\partial f(x_1,x_2,x_3)}{\partial x_1}=\lim_{\Delta x_1\to 0}\frac{f(x_1+\Delta x_1,x_2,x_3)-f(x_1,x_2,x_3)}{\Delta x_1}$$

$$=\lim_{\Delta x_1\to 0}f(x_1+\Delta x_1,x_1,x_2,x_3)$$

$$=f(x_1,x_1,x_2,x_3)$$

把差商 $f(x_1,x_2,x_3)$ 对 x_1 求偏导称为 $f(x)$ 关于 x_2,x_3 及二重节点 x_1 的差商，简称为汇合差商.

显然，由多元微分法，可推得

$$\frac{\partial^k f(x_1,x_2,x_3)}{\partial x_1^k}=k!f(\underbrace{x_1,\cdots,x_1}_{k+1},x_2,x_3)$$

特别是

$$\frac{d^k f(x)}{dx^k}=k!f(\underbrace{x,x,\cdots,x}_{k+1})$$

当然，可以定义更一般的汇合差商，我们就不介绍了.

总之，汇合差商是极限值，它是与某函数的相应偏导数有关的量.

§ 5 爱尔米特插值多项式

1 爱尔米特插值的几何意义是：所求插值曲线不仅通过已知点 $(x_i,y_i)(i=0,1,\cdots,n)$，同时还要求在某些节点上保持原曲线的几何性质（如斜率、曲率、……）.

2 带导数值的插值多项式的构造方法完全与不带导数值的插值多项式的构造方法一样. 例如牛顿形式的爱尔米特插值多项式的构造思想是：在原有的条件基础上，增加多少条件，就增加多少项，然后用待定系数法，依增加条件来确定这些项的具体内容.

3 本节及习题中的几个公式（5.22），（5.23）及（5.24）在样条插值中要用到，因此，一定要掌握它们.

4 用拉格朗日基本思想来推导拉格朗日——爱尔米特插值多项式，请读者见习题 4.5 第 5 题的习题解答.

§ 6　三次样条插值

1　三次样条函数 $S(x)$(或 $\widetilde{S}(x)$) 是一个分段函数。它的每个分段$[x_j, x_{j+1}]$的函数$S_j(x)$ (或$\widetilde{S}_j(x)$) 是满足条件

x	x_j	x_{j+1}
y	y_j	y_{j+1}
y'	m_j	m_{j+1}

或

x	x_j	x_{j+1}
y	y_j	y_{j+1}
y''	M_j	M_{j+1}

的爱尔米特插值多项式。

而其中 $m_j(j=1,2,\cdots,m-1)$或 $M_j(j=1,2,\cdots,n-1)$ 必须通过式 (6.11) 或习题4.6第 2 题才能求出的。

2　注意，本节仅介绍两种边界条件

(1)　$y'(x_0)=m_0$, $y'(x_n)=m_n$

(2)　$y''(x_0)=M_0$, $y''(x_n)=M_n$

还有混合型边界条件

$$\alpha_1 y'(x_0)+\beta_1 y''(x_0)=r_1$$

$$\alpha_2 y'(x_n)+\beta_2 y''(x_n)=r_2$$

我们就不去仔细研究它了。

3　除了三次样条函数之外，还有其它样条函数，如周期的样条插值函数，二次样条插值函数等等。我们仅把二次样条插值的定义介绍如下：

设在$[a,b]$上给定点的函数表

x	x_0	x_1	$\cdots$	x_n
y	y_0	y_1	$\cdots$	y_n
y'	y'_0			

求作一分段插值函数$p(x)$，使它在$[x_j, x_{j+1}]$上是二次多项式

$$p_j(x) = A_j x^2 + B_j x + C_j \quad x \in [x_j, x_{j+1}]$$且满足条件

（1）　$S(x_j) = y_j$；

（2）　$S'(x_0) = y'_0$；

（3）　在内样点上$S(x)$、$S'(x)$存在且连续，即

$S_{j-1}(x_j) = S_j(x_j)$

$S'_{j-1}(x_j) = S'_j(x_j)$　$(j = 1, 2, \cdots, n-1)$

把此函数$p(x)$称为二次样条插值函数.

§7　数值微分

1　利用插值法求导数的近似值时，应该特别注意误差估计，因为两个相差不多的函数的导数可能相差很大. 同时，对同一个函数，计算导数值时，缩小步长，截断误差虽然减少，但舍入误差却增加，因此，采用缩小步长的办法，也不一定达到提高精确度的目的.

如　求$f(x) = \sqrt{x}$在$x = 2$处的一阶导数，用数值微分公式

$$f'(x) = \frac{f\left(x + \frac{h}{2}\right) - f\left(x - \frac{h}{2}\right)}{h} + 0(h^2)$$

取不同的h进行计算，运算时按四位小数进行. 计算结果列表如下：

h	2	1	0.2	0.1	0.01	0.001
$f'(2)$	0.3660	0.3564	0.3535	0.3530	0.3500	0.3000
$R(f'(2))$	−0.012447	−0.002847	0.000053	0.000553	0.003553	0.053553

其中$R(f'(2)) = \frac{1}{2\sqrt{2}} - f'(2)$.

从表中看出，当 $h=0.2$ 时，逼近的效果最佳，而当 h 比 0.2小时，反而逼近效果越来越差。

2　提高微商精确度的办法——李查逊外推法.（一般想法在数值积分中提出），仅通过例子说明之.（注：$f^{(k)}(x_i)=f_i^{(k)}$）.

由台劳展开式

$$f_1=f_0+hf_0'+\frac{h^2}{2!}f_0''+\frac{h^3}{3!}f_0'''+\cdots$$

$$f_{-1}=f_0-hf_0'+\frac{h^2}{2!}f_0''-\frac{h^3}{3!}f_0'''+\cdots$$

上两式相减，得

$$f_1-f_{-1}=2h\left(f_0'+\frac{h^2}{3!}f_0'''+\frac{h^4}{5!}f_0^{(5)}+\cdots\right)$$

则得到

$$f_0'=\frac{f_1-f_{-1}}{2h}-\left(\frac{h^2}{3!}f_0'''+\frac{h^4}{5!}f_0^{(5)}+\cdots\right)\qquad(1)$$

或令　$y'_{0,h}=\dfrac{f_1-f_{-1}}{2h}$　则上式又记成

$$f_0'=y'_{0,h}-\left(\frac{h^2}{3!}f_0'''+\frac{h^4}{5!}f_0^{(5)}+\cdots\right)$$

$$=y'_{0,h}+0(h^2)$$

同理，f_2 与 f_{-2} 有

$$f_0'=\frac{f_{1/2}-f_{-1/2}}{4h}-\left(\frac{(h/2)^2}{3!}f_0'''+\frac{(h/2)^4}{5!}f_0^{(5)}+\cdots\right)$$

$$=y_0',_{h/2}-\left(\frac{(h/2)^2}{3!}f_0'''+\frac{(h/2)^4}{5!}f_0^{(5)}+\cdots\right)\qquad(2)$$

（1）乘上$\left(\frac{1}{2}\right)^2$ 减去（2），得

$$\left[1-\left(\frac{1}{2}\right)^2\right]f_0'=y'_{0,h/2}-\left(\frac{1}{2}\right)^2y'_{0,h}+$$

$$+\left[\frac{\left(\frac{1}{2^4}-\frac{1}{2^2}\right)h^4}{5!}f_0^{(5)}+\cdots\right]$$

则有

$$f_0' = \frac{y'_{0,h/2} - \left(\frac{1}{2}\right)^2 y'_{0,h}}{1-\left(\frac{1}{2}\right)^2} - \frac{h^4}{2^2 \cdot 5!} f_0^{(5)} + \cdots$$

故得微分近似公式

$$f_0' \doteq \frac{4\left[\frac{f_{1/2} - f_{-1/2}}{4h} - \frac{1}{4}\left(\frac{f_1 - f_{-1}}{2h}\right)\right]}{3}$$

$$= \frac{f_{-1} - 2f_{-1/2} + 2f_{1/2} - f_1}{h}$$

显然，用上式计算 f_0'，其截断误差为 $0(h^4)$.

同理，可以照此继续做下去. 把这种做法称为外推算法（李查逊外推法）.

§ 8　最小二乘法

1　本节把求逼近多项式的问题，转化为求多元函数 $\varphi(a_0, a_1, \cdots, a_n)$的极值问题.

2　求 $g_m(x)$ 的解题步骤：

（1）　确定所求 $g_m(x)$ 的次数 m；

（2）　建立正规方程组，即（8.4）

$$S_k = \sum_{i=0}^{n} x_i^k, \qquad f_k = \sum_{i=0}^{n} y_i x_i^k$$

$$k = 0, 1, 2, \cdots, 2m \qquad k = 0, 1, 2, \cdots, m$$

求出系数 S_k 及常数项 f_k.

（3）　解正规方程组，得 a_k.

（4）　代入（8.1）得 $g_m(x)$，便是所求离散条件下的逼近多项式.

3　使用最小二乘法解决实际问题时，应注意以下二点：

（1） 被逼近函数 $f(x)$ 一定是离散形式，如果 $f(x)$ 是解析式时，也要求出在节点 x_i 上的函数值 $f(x_i)$，才能使用此法。

（2） 本章规定 $g_m(x)$ 一定是多项式。如利用最小二乘法求拟合曲线的解析式，当由函数表所确定的拟合曲线不是多项式时，必须经过适当的变形，使它变成多项式。然后，对变形后的多项式，应用最小二乘法求之，最后再把所求得的多项式，变换成原来函数形式，它便是所求的拟合曲线的解析式。举例如下：

已知函数表

t	t_0	t_1	$\cdots$	t_n
Q	Q_0	Q_1	$\cdots$	Q_n

求其拟合曲线的解析式。

解 经建立坐标系，描点知其拟合曲线属于幂指函数

$$Q=qt^p$$

其中 p、q 为未知数

对上式两边取对数，且令 $\lg Q=y$，$x=\lg t$，$a_0=\lg q$，$a_1=p$，则得一次多项式

$$y=a_0+a_1x$$

相应地，函数表变成如下

x	x_0	x_1	$\cdots\cdots$	x_n
y	y_0	y_1	$\cdots\cdots$	y_n

也就是按上表求最小二乘法的线性多项式 $y=a_0+a_1x$，然后，变换原来形式，即为所求。

注意，此时所求的 $Q=qt^p$ 并不一定满足如下意义：$Q=qt^p$ 使

$$\sum_{i=0}^{n}(Q(t_i)-qt_i^p)^2$$

为最小，

而是这样的意义： $Q=qt^p$ 使

$$\sum_{i=0}^{n}\left(\lg\frac{Q(t_i)}{qt_i^p}\right)^2$$

为最小。

4　正规方程组的病态分析

因为求 $g_m(x)$，必须解正规方程组，但其系数阵随 m 的增大，越来越病态。故一般 m 不能取太大。

设正规方程组（8.5）记为

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{f}$$

其中

$$\boldsymbol{A}\text{ 的元素 } a_{ij}=\sum_{k=0}^{n}x_k^{i+j}\qquad(i,j=0,1,2,\cdots,m)$$

$$\boldsymbol{f}\text{ 的分量 } f_j=\sum_{k=0}^{n}y_kx_k^j\qquad(j=0,1,2,\cdots,m)$$

$\boldsymbol{x}$ 的分量为 a_j

且假定节点为等距时，$h_i=x_{i+1}-x_i=h=\dfrac{b-a}{n}$，又设 $[a,b]=[0,1]$，$h=\dfrac{1}{n}$。对正规方程组两边乘以 h，且 $n\to\infty$ 时，则变成如下方程组

$$\overline{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{x}=\overline{\boldsymbol{f}}$$

其中

$$\overline{\boldsymbol{A}}=\begin{pmatrix}1 & \frac{1}{2}\cdots\cdots & \frac{1}{m+1}\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3}\cdots\cdots & \frac{1}{m+2}\\ \vdots & \vdots\cdots\cdots & \vdots\\ \frac{1}{m+1} & \frac{1}{m+2}\cdots & \frac{1}{2m+1}\end{pmatrix}$$

$\overline{f}$的分量 $\overline{f_i}=\int_0^1 f(x)x^i dx$. 由此，考察正规方程组 $Ax=f$ 的病态性，变成考察正规方程组$\overline{A}x=\overline{f}$的病态性. 因为$\overline{A}$的逆$\overline{A}^{-1}$的元素为

$$a_{ij}^{-1}=\frac{(-1)^{i+j}(m+i)!(m-j)!}{(i+j-1)[(i-1)!(j-1)!]^2(m+1-j)!(m+1-i)!}$$

$$1\leqslant i,j\leqslant n$$

按第三章知识，便可求得阵$\overline{A}$的条件数，列表如下：

m	$\mathrm{cond}(\overline{A})$	m	$\mathrm{cond}(\overline{A})$
2	5.24E2	6	4.75E8
3	1.55E4	7	1.53E10
4	4.77E5	8	4.93E11
5	1.50E7	9	1.60E13

其中$E_2=10^2$, $\mathrm{cond}(\overline{A})=\frac{\max|\lambda_{\overline{A}}|}{\mathrm{mix}|\lambda_{\overline{A}}|}$

例如 $m=2$

$$\overline{A}_2=\begin{pmatrix}1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3}\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4}\\ \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5}\end{pmatrix}$$

若$\overline{A}_2$中元素$\frac{1}{3}\doteq 0.3333$，则

$$\widetilde{A}_2=\begin{pmatrix}1 & 0.5000 & 0.3333\\ 0.5000 & 0.3333 & 0.2500\\ 0.3333 & 0.2800 & 0.5000\end{pmatrix}$$

于是$\overline{A}_2$与$\widetilde{A}_2$的逆

$$\overline{A}_3^{-1}=\begin{pmatrix} 9.000 & -36.00 & 30.00 \\ -36.00 & 192.0 & -180.0 \\ 30.00 & -180.0 & 180.0 \end{pmatrix}$$

$$\widetilde{A}_3^{-1}=\begin{pmatrix} 9.062 & -36.32 & 30.30 \\ -36.32 & 193.7 & -181.6 \\ 30.30 & -181.6 & 181.5 \end{pmatrix}$$

其元素的绝对误差扩大不少倍。即

$$\max|\overline{a}_{ij}-\widetilde{a}_{ij}|\leqslant 0.00003$$

而

$$\max|\overline{a}_{ij}^{-1}-\widetilde{a}_{ij}^{-1}|\doteq 1.7$$

$$\frac{\max|\overline{a}_{ij}^{-1}-\widetilde{a}_{ij}^{-1}|}{\max|\overline{a}_{ij}-\widetilde{a}_{ij}|}\doteq 51000\ (\text{倍})$$

由上看出，$\overline{A}$的病态性是严重的。

5　在本节定理的论证中，关系式

$$\sum_{i=0}^{m}\left\{a_i\sum_{j=0}^{m}S_{k+j}a_j\right\}=\sum_{k=0}^{n}(g_m(x_i))^2$$

的具体推导如下：

$$\begin{aligned}
\text{左式} &= \sum_{k=0}^{m}\left\{a_k\sum_{j=0}^{m}\left[\sum_{i=0}^{n}x_i^{\,k+j}\right]a_j\right\} \\
&= \sum_{k=0}^{m}\left\{a_k\sum_{j=0}^{m}\left[\sum_{i=0}^{n}x_i^k\cdot x_i^j\right]a_j\right\} \\
&= \sum_{k=0}^{m}\left\{a_k\sum_{i=0}^{n}\left(\sum_{j=0}^{m}x_i^j a_j\right)x_i^k\right\} \\
&= \sum_{k=0}^{m}\left\{a_k\sum_{i=0}^{n}(g_m(x_i))x_i^k\right\} \\
&= \sum_{i=0}^{n}\sum_{k=0}^{m}(g_m(x_i)\cdot a_k x_i^k) \\
&= \sum_{i=0}^{k}g_m(x_i)\left(\sum_{k=0}^{m}a_k x_i^k\right)
\end{aligned}$$

$$= \sum_{i=0}^{n} (g_n(x_i))^2$$

6　对矛盾方程组的求解，应该重视。

我们这里是指未知量的个数小于方程组的方程个数的矛盾方程组。

已知 m 个未知量 n 个方程的矛盾方程组

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \qquad (1)$$

其中

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_m)'$$

$$\boldsymbol{b} = (b_1, b_2, \cdots, b_n)'$$

用最小二乘法求其解。首先引入偏差向量

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}$$

其中

$$\boldsymbol{u} = (u_1, u_2, \cdots, u_n)'$$

$$u_i = \sum_{j=1}^{m} a_{ij} x_j - b_i$$

把使偏差向量的

$$\|\boldsymbol{u}\|_2^2 = \sum_{i=1}^{n} u_i^2$$

为最小的向量 $\boldsymbol{x}$ 作为矛盾方程组的近似解。

为了说明方便，记

$$\|\boldsymbol{u}\|_2^2 = \varphi(x_1, x_2, \cdots, x_m)$$

也就是

$$\frac{\partial \varphi(x_1, x_2, \cdots, x_m)}{\partial x_k} = 2\sum_{i=1}^{n} u_i a_{ik} = 0$$

整理成

$$\sum_{j=1}^{m}\left(\sum_{i=1}^{n} a_{ij} a_{ik}\right) x_j=\sum_{i=1}^{n} a_{ik} b_i \quad (k=1,2,\cdots,m)$$

或记成

$$\overline{A} x=\overline{b} \tag{2}$$

其中

$$\overline{A}=\begin{pmatrix}\sum_{i=1}^{n} a_{i1}^2 & \sum_{i=1}^{n} a_{i1} a_{i2} & \cdots & \sum_{i=1}^{n} a_{i1} a_{im} \\ \sum_{i=1}^{n} a_{i2} a_{i1} & \sum_{i=1}^{n} a_{i2}^2 & \cdots & \sum_{i=1}^{n} a_{i2} a_{im} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \sum_{i=1}^{n} a_{im} a_{i1} & \sum_{i=1}^{n} a_{im} a_{i2} & \cdots & \sum_{i=1}^{n} a_{im}^2\end{pmatrix}$$

$$\overline{b}=\left(\sum_{i=1}^{n} a_{i1} b_i, \sum_{i=1}^{n} a_{i2} b_i, \cdots, \sum_{i=1}^{n} a_{im} b_i\right)'$$

由此解矛盾方程组(1)，变成解正规方程组（2）。
同样，此正规方程组也是病态的。

§ 9 正交多项式

1 正交多项式序列 $\{\varphi_k(x)\}$，是指其内任意两个多项式均满足在 $[a,b]$ 上带权 $\rho(x)$ 正交的定义。反之，如 $\varphi_1(x)=x$，$\varphi_2(x)=x^2$，且有

$$\int_{-1}^{1} x \cdot x^2 dx=0$$

则可说，多项式 x 与 x^2 在 $[-1,1]$ 上是正交的，但不能说多项式序列 $1, x, x^2, \cdots, x^k, \cdots$ 在 $[-1,1]$ 上是正交的。比如：

$$(x, x^3)=\int_{-1}^{1} x \cdot x^3 dx=\frac{2}{5} \neq 0$$

所以不满足定义 2。

2 同一正交多项式序列，有三种不同形式：

$$\{\varphi_k(x)\}、\{\overline{\varphi}_k(x)\}、\{\widehat{\varphi}_k(x)\}$$

但只要知道其中一种形式，按它们定义，便可推另两种形式。特别要注意$\overline{\varphi}_k(x)$、$\widehat{\varphi}_k(x)$是唯一确定的，而 $\varphi_k(x)$ 在仅差一个常数因子的意义下是唯一确定的.

例如　勒让德多项式的罗得立克形式为

$$p_k(x)=\frac{1}{2^k k!}\frac{d^k}{dx^k}(x^2-1)^k$$

如果，我们不这样定义勒让德多项式，而以下面形式作为定义，即

$$p_k^*(x)=\frac{d^k}{dx^k}(x^2-1)^k \tag{A}$$

显然，它是满足书上定义 3 的，即

$$(p_j^*,p_k^*)=0\quad(j\neq k)$$

其中　$\rho(x)=1$。

又因为　$p_k^*(x)=2^k k!\,p_k(x)$，所以

$$\sigma_k^*=(p_k^*,p_k^*)=\frac{2}{2k+1}(2^k k!)^2$$

又因为　$p_k^*(x)$的首项系数为$\dfrac{(2k)!}{k!}$，所以

$$\overline{p_k}^*(x)=\frac{p_k^*(x)}{(2k)!/k!}=\overline{p}_k(x)$$

即首项系数为 1 的 k 次勒让德多项式。

同理，可得

$$\widehat{p}_k^*(x)=\widehat{p}_k(x)$$

3　定理 5 (9.18)推导过程如下：因为

$$\left(\overline{f}_{n-1},\ \overline{p}_n\right)=\int_{-1}^{1}\overline{f}_{n-1}(x)\overline{p}_n(x)dx$$

所以，令　$U=\overline{f}_{n-1}(x)$，$u'(x)=\overline{p}_n(x)$，则

$$U'=\overline{f'}_{n-1}(x),\quad u(x)=\int_{-1}^{x}\overline{p}_n(x)dx\quad(\text{记为}u_1(x))$$

于是

$$(\overline{f}_{n-1},\overline{p}_n)=[\overline{f}_{n-1}(x)u_1(x)]\Big|_{-1}^{1}-\int_{-1}^{1}\overline{f}'_{n-1}(x)u_1(x)dx$$

对右边积分再用分部积分法，且作类似假定

$$u_2(x)=\int_{-1}^{x}u_1(x)dx$$

得

$$(\overline{f}_{n-1},\overline{p}_n)=(\overline{f}_{n-1}(x)u_1(x)-\overline{f}'_{n-1}(x)u_2(x)\Big|_{-1}^{1}+\int_{-1}^{1}\overline{f}''_{n-1}(x)u_2(x)dx$$

继续用分部积分法，且注意$\overline{f}_{n-1}(x)$为$n-1$次多项式，及符号规律，便可推得(9.18)。

4　式(9.21)的证明

因　$\overline{p}_n(x)=\dfrac{n!}{(2n)!}\dfrac{d^n(x^2-1)^n}{dx^n}$

$$=x^n+Bx^{n-1}+\cdots+a_0$$

则由性质3°，得

$$(\overline{p}_n(x),\overline{p}_n(x))=\frac{n!}{(2n)!}\int_{-1}^{1}x^n\frac{d^n(x^2-1)^n}{dx^n}dx$$

对上式中积分用分部积分法：

$$V=x^n,\quad u'=\frac{d^n(x^2-1)^n}{dx^n}$$

$$V'=nx^{n-1},\quad u=\frac{d^{n-1}(x^2-1)^n}{dx^{n-1}}$$

得

$$\int_{-1}^{1} x^n \frac{d^n (x^2-1)^n}{dx^n} dx = \left(x^n \cdot \frac{d^{n-1}(x^2-1)^n}{dx^{n-1}} \right) \Big|_{-1}^{1} - $$

$$-n\int_{-1}^{1} x^{n-1} \frac{d^{n-1}(x^2-1)^n}{dx^{n-1}} dx$$

又因为 $x^n \cdot \frac{d^{n-1}(x^2-1)^n}{dx^{n-1}}$ 为 $2n-1$ 次多项式，且为奇函数。

所以，上式右边第一项为零。即

$$\int_{-1}^{1} x^n \frac{d^n(x^2-1)^n}{dx^n} dx = -n\int_{-1}^{1} x^{n-1} \frac{d^{n-1}(x^2-1)^n}{dx^{n-1}} dx$$

注意等式两边指标关系，便可推得递推关系式

$$\int_{-1}^{1} x^n \frac{d^n(x^2-1)^n}{dx^n} dx$$

$$=(-n)(-(n-1))\cdots(-1)\int_{-1}^{1}(x^2-1)^n dx$$

因为

$$\int_{-1}^{1}(x^2-1)^n dx = \int_{-1}^{1}(x-1)^n(x+1)^n dx$$

$$=\frac{(-1)^n(n!)^2}{(2n)!} \quad \frac{2^{2n+1}}{2n+1}$$

代入，最后得(9.21)。

5　要掌握正交多项式及其序列共性：

（1）　正交多项式序列是完备的基础解系。

（2）　正交多项式与低于其次数的多项式为带权正交的。

（3）正交多项式具有三项递推关系：

$$\overline{\varphi}_{n+1}(x)=(x-C_n)\overline{\varphi}_n(x) - C_{n-1}\overline{\varphi}_{n-1}(x)$$

其中

$$C_n=\frac{(x\overline{\varphi_n},\overline{\varphi_n})}{(\overline{\varphi_n},\overline{\varphi_n})},\quad C_{n-1}=\frac{(\overline{\varphi_n},\overline{\varphi_n})}{(\overline{\varphi_{n-1}},\overline{\varphi_{n-1}})}$$

（4）正交多项式的零点分布：在〔a,b〕内全部是实的，个数与多项式次数相同，且互异的。

（5）n 次正交多项式是微分方程

$$\frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}}\left(\frac{1}{\rho(x)}\frac{d^n u_n(x)}{dx^n}\right)=0$$

及边值条件

$$u_n^{(i)}(a)=0,\ i=0,1,2,\cdots,n-1$$

$$u_n^{(i)}(b)=0,\ i=0,1,2,\cdots,n-1$$

的解。

6　切比雪夫多项式在插值多项式上的应用。

因为在〔$-1,1$〕区间上，首项系数为 1 的 $n+1$ 次多项式的绝对值最大值为最小的多项式是切比雪夫多项式，于是要使拉格朗日插值公式

$$f(x)=L_n(x)+R_n(f,x)$$

余项估计式

$$|R_n(f,x)|\leqslant\frac{M_{n+1}}{(n+1)!}|\omega(x)|$$

尽量小，只要把节点 x_i 取成切比雪夫多项式的根就可以了。因为这时 $|\omega(x)|$ 最小。

对于一般区间可利用变换

$$x=\frac{a+b}{2}+\frac{b-a}{2}t$$

使〔a,b〕变到〔$-1,1$〕。

§10　最小平方逼近

1　它与最小二乘法在本质上是一样的，仅已知函数的给

出形式不同：前者是离散形式，这里是连续形式．因此，讨论的步骤基本一样。

2　求最小平方逼近多项式的步骤

（1）　根据要求选定m，及相应地正交多项式序列$\{\varphi_k(x)\}$。

（2）　按（10.5）求出C_j。

（3）　代入(10.2)，且整理便是所求最小平方逼近多项式。

3　注意同一函数，使用不同的正交多项式所得的最小平方逼近多项式，一般是不一样的。但相差的并不大。

4　本节主要应用正交多项式的特性，提出求$g_n(x)$的简便方法，同样对离散形式也是适用的。仅把定义(9.1)变为

$$\sum_{i=0}^{n}\rho(x_i)\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i)=\begin{cases}0 & j\neq k\\ \sigma_j & j=k\end{cases} \tag{1}$$

则称$\{\varphi_n(x)\}$在点$x_0,x_1,\cdots,x_n$上带权$\rho(x)$正交多项式序列。

定理1仍成立且改写成为

$$f_n(x)=\sum_{k=0}^{n}C_k\varphi_k(x) \tag{2}$$

其中

$$C_k=\frac{1}{\sigma_k}\sum_{i=0}^{n}\rho(x_i)\varphi_k(x_i)f_n(x_i) \tag{3}$$

$$(k=0,1,2,\cdots,n)$$

定理2仍然成立。

定理3　正交多项式的递推关系式为

$$\overline{\varphi}_{j+1}(x)=(x-\alpha_{j+1})\overline{\varphi}_j(x)-\beta_j\overline{\varphi}_{j-1}(x),\quad j=0,1,2,\cdots \tag{4}$$

其中

$$\overline{\varphi}_0(x)=1,\qquad \overline{\varphi}_{-1}(x)=0$$

$$\beta_j=\frac{\sigma_j}{\sigma_{j-1}},\qquad \alpha_{j+1}=\frac{r_j}{\sigma_j} \tag{5}$$

$$r_i=\sum_{i=0}^{n}\rho(x_i)x_i[\overline{\varphi}_i(x_i)]^2$$

由此，利用正交多项式，对最小二乘法，也可不用解正规方程组了．变成如下计算公式

$$g_m(x)=\sum_{k=0}^{m}C_k\varphi_k(x) \tag{6}$$

而

$$C_k=\omega_k/\sigma_k \tag{7}$$

其中

$$\omega_k=\sum_{i=0}^{n}\rho(x_i)f(x_i)\varphi_k(x_i) \tag{8}$$

$$\sigma_k=\sum_{i=0}^{n}\rho(x_i)[\varphi_k(x_i)]^2 \tag{9}$$

仍举§8 例11为例．

解 因为 $m=1,n=4$，$g_1(x)=C_0+C_1\varphi_1(x)$．设 $\rho(x)=1$，$\varphi_0(x)=1$，$\varphi_0(x_i)=1$，所以

$$\sigma_0=5,\quad \omega_0=\sum_{i=0}^{4}f(x_i)=52.90$$

于是

$$b_0=\frac{\omega_0}{\sigma_0}=10.58$$

因为 $r_0=\sum_{i=0}^{4}x_i=300$，所以

$$\alpha_1=\frac{r_0}{\sigma_0}=60$$

代入（5）得

$$\varphi_1(x)=x-\alpha_1=x-60$$

再求 $\sigma_1=\sum_{i=0}^{4}(x_i-60)^2=4000$，

$$\omega_1=\sum_{i=0}^{4}f(x_i)(x_i-60)^2=623.$$

得

$$b_1 = \frac{\omega_1}{\sigma_1} = 0.15575$$

代入 $g_m(x)$ 得

$$g_1(x) = b_0 + b_1 p_1(x)$$
$$= 10.58 + 0.15575(x - 60)$$
$$= 1.235 + 0.15575x$$

显然与以前结果一样。但避免了解正规方程组。

5　若 $f(x)$ 是定义在区间〔a, b〕上，而选的正交多项式组，定义在〔$-1,1$〕上时，则求 $f(x)$ 的最小平方逼近多项式 $g_n(x)$ 时，首先，要求引入变换

$$x = \frac{b + a + (b - a)t}{2} \tag{10}$$

使区间〔a,b〕变到〔$-1,1$〕上，$f(x)$变成$F(t)$，即

$$f(x) = F(t)$$

四　复习思考题

1　已知函数 $f(x)$ 的函数表

x_i	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5
y_i	0.769	0.472	0.103	-0.344	-0.875

求 $f(x)$ 在〔1.1,1.5〕上的近似零点。

2　利用差分性质证明：

$$1\cdot3 + 2\cdot4 + \cdots + n(n+2) = \frac{1}{6}n(n+1)(7+2n)$$

3　已知函数表

x_i	x_0	x_1	x_2
$f(x_i)$	y_0	y_1	y_2

试构造一三角多项式

$$y(x) = A_0 + A_1\cos x + A_2\sin x \tag{1}$$

使它满足插值条件

$$y(x_0)=y_0,\ y(x_1)=y_1,\ y(x_2)=y_2 \tag{2}$$

4 试导出用最小二乘法解矛盾方程组的一般公式。

5 试求在 $[0,+\infty]$ 上带权 $\rho(x)=e^{-x}$ 的 n 次正交多项式，且写出 $n=0,1,2$ 的具体形式。

五 本 章 小 结

（一）插值与平方逼近

本章主要从误差函数 $R(x_i)=0$ 或 $\min\int_a^b[R(x)]^2dx$（离散时，“积分号”变成“和号”）出发，对于插值逼近介绍了拉格朗日插值公式、牛顿插值公式，带导数的爱尔米特插值以及样条插值。对于平方逼近介绍了最小二乘法和最小平方逼近，两种逼近函数虽都是多项式，但多项式的次数确有差异，一般来讲：当已知条件数目为 n 时，则插值多项式的次数 $m\leqslant n-1$，而最小平方逼近多项式的次数$m\ll n$。

插值与最小平方逼近在求近似函数、近似函数值、近似根、构造数学用表、经验公式、解矛盾方程组是很方便的，同时也是数值微分、数值积分、常微分方程数值解等各种数值方法的基础

（二） 龙格现象

无论插值还是平方逼近，一般来说，插值点越多或逼近多项式的次数越高越精确，但也有反常现象，今举一反例说明之。

例 给定 $f(x)=\dfrac{1}{1+25x^2}\qquad(-1\leqslant x\leqslant 1)$

分别以等距节点 $x_i=-1+\dfrac{i}{5}\quad(i=0,1,2,\cdots,10)$ 及等距节点 $\overline{x_i}=-1+\dfrac{i}{2}\quad(i=0,1,2,3,4)$ 作两个插值多项式，并研究它们与 $f(x)$ 的误差变化情况。

解　由节点组　$x_i=-1+\frac{i}{5}$　$(i=0,1,2,\cdots,10)$得

$$P_{10}(x)=\sum_{i=0}^{10} l_i(x)y_i$$

又由节点组　$x_i=-1+\frac{i}{2}$　$(i=0,1,2,3,4)$　得

$$P_4(x)=\sum_{i=0}^{4} l_i(x)y_i$$

比较 $P_{10}(x)$、$P_4(x)$ 与 $f(x)$ 在区间 $[-1.00,-0.80]$ 及 $[-0.20,\ 0.00]$ 上函数值变化、列表如下：

x	$\frac{1}{1+25x^2}$	$L_{10}(x)$	$L_4(x)$	x	$\frac{1}{1+25x^2}$	$L_{10}(x)$	$L_4(x)$
-1.00	0.03846	0.03846	0.03846	-0.20	0.50000	0.50000	0.83422
-0.96	0.04160	1.80438	-0.12572	-0.16	0.60976	0.64316	0.89268
-0.90	0.04706	1.57872	-0.28913	-0.10	0.80000	0.84340	0.95756
-0.86	0.05131	0.88808	-0.34972	-0.06	0.91743	0.94090	0.98465
-0.80	0.05131	0.05882	-0.37931	0.00	1.00000	1.00000	1.00000

由表看出如下结论：节点加密或者说增加插值多项式的次数，并不一定能保证 $f_n(x)$ 能很好的逼近 $f(x)$，有时，某些地方逼近得很坏，如 $[-1,-0.8]$，其原因是被插函数为有理分式，而我们用多项式去近似替代它，所以逼近程度在某些地方比较坏，如果用有理插值或用分段插值去逼近，则要比提高插值多项式的次数要好，把这种现象称为龙格现象。如图4.3.

（三）　逐次线性插值法（迭代插值法）

在计算某点函数的近似值时，为了便于使用电子计算机去求函数值，把插值多项式变成如下递推式

$$L_{k,d+1}(x)=\frac{(x_k-x)L_{d,d}(x)-(x_d-x)L_{k,d}(x)}{x_k-x_d}$$

$$d=0,\ 1,\ 2,\ \cdots,\ n-1,\ k=d+1,\cdots,n \qquad (1)$$

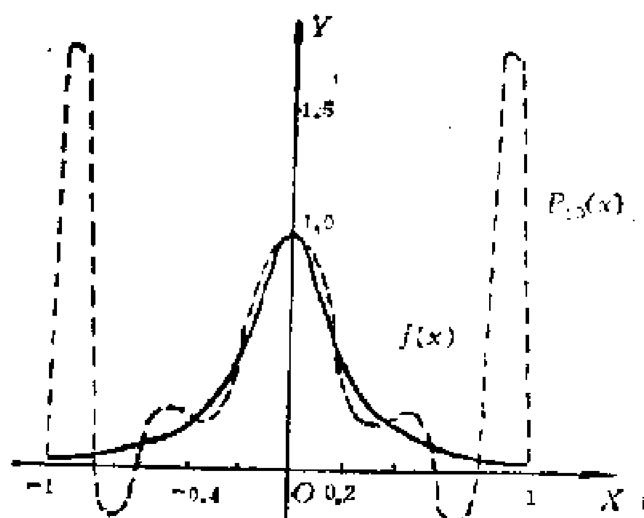


图4.3

其中　$L_{k,0}(x)=y_k$，　$k=0,1,2,\cdots n$

$L_{k,d}(x)$表示由已知函数表

x	x_0	$x_1\cdots x_{d-1}$	x_k
y	y_0	$y_1\cdots y_{d-1}$	y_k

所作的节点为 $x_0,x_1,\cdots,x_{d-1},x_k$的 d 次拉格朗日插值多项式。（1）式的特点是，计算简单、充分利用以前的计算结果。

例　已知

x	1	2	3
y	1	-1	2

求其函数在 $x=\frac{3}{2}$之近似值。

解　因为　$n=2$，　$x=\frac{3}{2}$，$L_{k;0}=y_i$　令　$d=0$

则　$$L_{1,1}\left(\frac{3}{2}\right)=\frac{(x_1-x)L_{0,0}(x)-(x_0-x)L_{1,0}(x)}{x_1-x_0}$$

$$=\frac{\left(2-\frac{3}{2}\right)\times 1-\left(1-\frac{3}{2}\right)\times(-1)}{2-1}=0$$

同理，由（1）可求 $L_{2,1}\frac{3}{2}=\frac{5}{4}$ 又令$d=1$

$$L_{2,2}\left(\frac{3}{2}\right)=\frac{\left(x_2-\frac{3}{2}\right)L_{1,1}\left(\frac{3}{2}\right)-\left(x_1-\frac{3}{2}\right)L_{2,1}\left(\frac{3}{2}\right)}{x_2-x_1}$$

$$=-\frac{\left(2-\frac{3}{2}\right)\times\frac{5}{4}}{3-2}=-\frac{5}{8}$$

如果在增加一点，$(x_3,y_3)=(4,5)$，再求此近似值，只要再算一下 $k=3,d=1,2,3$，即 $L_{3,1}$、$L_{3,2}$、$L_{3,3}$，而 $L_{3,3}$ 就是所求的近似值。

所得近似值列表如下：

k	x_k	x_k-x	$L_{k,0}=y_k$	$L_{k,1}$	$L_{k,2}$	$L_{k,3}$
0	1	$-\frac{1}{2}$	1			
1	2	$\frac{1}{2}$	-1	0		
2	3	$\frac{3}{2}$	2	$\frac{5}{4}$	$-\frac{5}{8}$	
3	4	$\frac{5}{2}$	5	$\frac{5}{3}$	$-\frac{5}{12}$	$-\frac{45}{48}$

所以 $$L_{3,3}\left(-\frac{3}{2}\right)=-\frac{45}{48}$$

（四）其它逼近方法简介

我们不想深入讨论其它的逼近方法，而是介绍以其它函数的形式，比如有理函数、幂函数作为插值函数的插值法。解决办法，步骤基本不变。

例 已知函数表

x	x_1	x_2	x_3
$f(x)$	f_1	f_2	f_3

求作一插值函数

$$y(x)=c_1e^{\alpha_1x}+c_2e^{\alpha_2x}+c_3e^{\alpha_3x} \tag{1}$$

其中 α_i 为常数，记 $\alpha_i=i$，使 $y(x_i)=f(x_i)$。

解 由条件（1）得

$$\begin{cases} c_1e^{x_1}+c_2e^{2x_1}+c_3e^{3x_1}=f(x_1)\\ c_1e^{x_2}+c_2e^{2x_2}+c_3e^{3x_2}=f(x_2)\\ c_1e^{x_3}+c_2e^{2x_3}+c_3e^{3x_3}=f(x_3)\end{cases} \tag{2}$$

由克莱姆法则知

$$c_i=\frac{D_i}{D}\quad i=1,2,3,\text{其中}$$

$$D=\begin{vmatrix} e^{x_1} & e^{2x_1} & e^{3x_1}\\ e^{x_2} & e^{2x_2} & e^{3x_2}\\ e^{x_3} & e^{2x_3} & e^{3x_3}\end{vmatrix}\qquad D_1=\begin{vmatrix} f(x_1) & e^{2x_1} & e^{3x_1}\\ f(x_2) & e^{2x_2} & e^{3x_2}\\ f(x_3) & e^{2x_3} & e^{3x_3}\end{vmatrix}$$

于是所求插值函数为

$$y(x)=C_1e^{x_1}+C_2e^{2x_2}+C_3e^{3x_3}$$

从逼近的形式上讲，还有最佳逼近，也就是求已知函数 $f(x)$在区间 $[a,b]$ 上的逼近函数 $y(x)$（设为多项式），使它满足

$$\min\max_{x\in[a,b]}|f(x)-y(x)|$$

把 $y(x)$称为最佳逼近多项式。

第五章　数值积分学习指导

一　主 要 内 容

本章阐述了一般内插求积公式的基本思想，推导出等距节点的牛顿—柯特斯公式、梯形公式、辛卜生公式和非等距节点的高斯求积公式。给出衡量求积公式精确度的标准—代数精确度的概念。

二　基 本 要 求

本章的目的在于，使读者掌握数值积分的基本思想，基本公式以及处理问题的基本方法。由于求积公式比较多，它们在节点选取、系数A_k的求法、精确度、使用范围等方面有所差异。为此，根据具体问题，要求会选择精确度高、计算量小的公式来应用。

三　内 容 分 析

§2　内插求积公式

1　所谓内插求积公式，就是指公式

$$\int_a^b f(x)dx \doteq \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

中的系数

$$A_i = \int_a^b \frac{\omega(x)}{(x-x_i)\omega'(x_i)}dx \quad (i=0,1,2,\cdots,n)$$

否则，系数由其它办法求出的，叫机械求积公式。

2　如果说一个求积公式具有m次代数精确度，是指该公式对于

$$f(x)=1,x,x^2,\cdots,x^m$$

均精确成立，而对于 $f(x)=x^{m+1}$ 不精确成立。

3　构造内插求积公式的具体步骤是：

（1）在积分区间〔a,b〕上选取节点；

（2）求 A_i 及$f(x_i)$，代入(2.5)，便得到求积公式；

（3）用被积函数 $f(x)=1,x,\cdots,x^m$ 验证求积公式的精确程度。

4　例　对

$$\int_0^3 f(x)dx$$

构造一个至少具有三次代数精确度的求积公式。

解　由§2 中的定理知,具有 4 个节点的内插求积公式,至少有 3 次代数精确度．如果在〔0，3〕上取节点为 0，1，2，3，则内插求积公式为

$$\int_0^3 f(x)dx \doteq A_0f(0)+A_1f(1)+A_2f(2)+A_3f(3) \tag{1}$$

下面求 $A_i(i=0,1,2,3)$．

方法一　运用公式（2.6），其中

$\omega(x)=x(x-1)(x-2)(x-3)$，得

$$A_0=\int_0^3\frac{(x-1)(x-2)(x-3)}{(-1)(-2)(-3)}dx$$

$$=-\frac{1}{6}\int_0^3(x^3-6x^2+11x-6)dx=\frac{3}{8}$$

同理可求得

$$A_1=\frac{9}{8};\quad A_2=\frac{9}{8};\quad A_3=\frac{3}{8}$$

代入（1）式，得求积公式为

$$\int_0^3 f(x)dx \doteq \frac{3}{8}[f(0)+3f(1)+3f(2)+f(3)] \quad (2)$$

方法二 把函数$f(x)=1$，x，x^2，x^3代入（1）式两端，代入（1）式左端，得

$$\int_0^3 1dx=3;\ \int_0^3 xdx=\frac{9}{2};\ \int_0^3 x^2dx=9;\ \int_0^3 x^3dx=\frac{81}{4}$$

然后按照代数精确度的定义，得方程组

$$\begin{cases} A_0+A_1+A_2+A_3=3 \\ A_1+2A_2+3A_3=\frac{9}{2} \\ A_1+4A_2+9A_3=9 \\ A_1+8A_2+27A_3=\frac{81}{4} \end{cases}$$

解此方程组，求出

$$A_0=\frac{3}{8};\ A_1=\frac{9}{8};\ A_2=\frac{9}{8};\ A_3=\frac{3}{8}$$

代入（1）式，得到求积公式

$$\int_0^3 f(x)dx \doteq \frac{3}{8}[f(0)+3f(1)+3f(2)+f(3)] \quad (3)$$

下面验证求积公式（3）的代数精确度。

由§3定理知，具有4个节点的内插求积公式，至少有3次代数精确度。于是，设

$$f(x)=x^4$$

代入（3）式两端，发现（3）式不精确成立。所以，求积公式（3）具有3次代数精确度。由此可知，（3）式即为所求的求积公式。

5　几点说明

（1）一个内插求积公式，具有其本身固有的最低代数精确度。即$n+1$个节点的内插求积公式至少有n次代数精确度。但不等于说，其精确度不能高于n次。也就是说，具有$n+1$个节点的内插求积公式的代数精确度可以高于n次，只要节点分

布选择的适当，这一点就可以办到。

（2）内插求积公式(2,6)的系数 A_k，与被积函数无关，只与积分区间 $[a, b]$、节点的个数及节点的分布有关。

（3）内插求积公式按节点是否包括端点，可分为开型与闭型两类．节点包括积分上下限的求积公式，叫做闭型求积公式．如例中的（3）．否则，叫开型求积公式．如（2．2）．

§3 等距节点求积公式

1 推导牛顿—柯特斯公式(3.4)的余项(3.5)、(3.6)．

由于牛顿内插公式的余项为

$$R(x)=\omega(x)f(x,x_0,x_1,\cdots,x_n)$$

其中 $f(x,x_0,x_1,\cdots,x_n)$是 $f(x)$的$n+1$阶差商，而

$$\omega(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$$

因此，牛顿——柯特斯求积公式的误差为

$$R_n(f)=\int_a^b\omega(x)f(x,x_0,x_1,\cdots,x_n)dx$$

又由于节点是等距的，故

$$R_n(f)=\int_a^b\omega(x)f(x,a,a+h,\cdots,a+nh)dx \qquad (1)$$

下面分两种情况进行讨论．

第一种情况 $n=2m$（此时节点个数为奇数）．这时

$$\omega(x)=(x-a)(x-a-h)\cdots(x-a-nh) \qquad (2)$$

$$-\omega(x)=(x-a)(x-a-h)\cdots(a+nh-x) \qquad (3)$$

令 $x-a=t$，即 $x=a+t$，代入（2）中，得

$$\omega(a+t)=t(t-h)\cdots(t-nh)$$

令 $a+nh-x=t$，即 $x=a+nh-t$，代入（3）中，得

$$\begin{aligned}\omega(a+nh-t)&=(nh-t)(nh-t-h)\cdots(nh-t-nh)\\&=(nh-t)((n-1)h-t)\cdots(-t)\\&=(-1)^{n+1}t(t-h)\cdots(t-nh)\end{aligned}$$

因为 n 是偶数，所以，由（2）与（3）可知

$$\omega(a+nh-t)=-t(t-h)\cdots(t-nh)=-\omega(a+t)$$

又因为 $h=\frac{b-a}{n}$，所以，有$a+nh=b$，代入上式，得

$$\omega(a+t)=-\omega(a+nh-t)=-\omega(b-t)$$

由此可见，$\omega(x)$ 的图形是以$[a,b]$的中点为其对称中心，如图5.1。令

$$\Omega(x)=\int_a^x \omega(t)dt$$

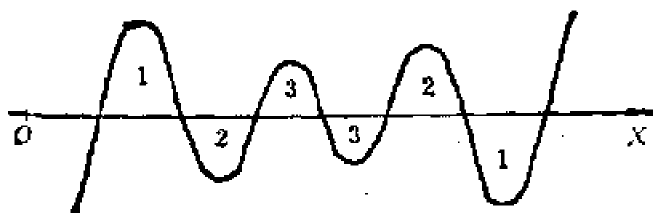


图 5.1

则

$$\Omega(a)=0;\ \Omega(b)=0$$

可以证明，图5.1中诸曲边梯形 1、2、3 的面积是依次递减的。从而可知，$\Omega(x)$ 在 $[a,b]$ 内永不为零，且保持符号不变。

注意以下事实

$$\Omega'(x)=\omega(x)$$

$$f'(x,a,\cdots,a+nh)=f(x,x,a,\cdots,a+nh)$$

于是，（1）可写为

$$R_n(f)=\int_a^b f(x,a,a+h,\cdots,a+nh)\Omega'(x)dx$$

对上式右端的积分用分部积分法，得

$$R_n(f)=\Omega(x)f(x,a,\ \cdots,a+nh)\Big|_a^b-$$

$$-\int_a^b \Omega(x)f'(x,a,\cdots,a+nh)dx$$

$$=-\int_a^b \Omega(x)f'(x,a,\cdots,a+nh)dx$$

又因为 $\Omega(x)$ 在区间$[a,b]$上不变号，所以，由积分中值定理，得

$$R_n(f)=-f(\xi,\xi,a,\cdots,a+nh)\int_a^b\Omega(x)dx \quad \xi\in[a,b]$$

根据差商与导数的关系可知，

$$f(\xi,\xi,a,a+h,\cdots,a+nh)=\frac{1}{(n+2)!}f^{(n+2)}(\eta)$$

$$\eta\in[a,b]$$

故

$$R_n(f)=-\frac{1}{(n+2)!}f^{(n+2)}(\eta)\int_a^b\Omega(x)dx$$

对上面积分，再用一次分部积分法，得到

$$\int_a^b\Omega(x)dx=x\Omega(x)\Big|_a^b-\int_a^b x\omega(x)dx$$

$$=-\int_a^b x\omega(x)dx$$

于是，最后得(3.5)式

$$R_n(f)=\frac{f^{(n+2)}(\eta)}{(n+2)!}\int_a^b x\omega(x)dx,\ \eta\in[a,b]$$

第二种情况，$n=2m+1$ 时，可仿第一种情况的证明（略）。

2　利用求积公式解题，其步骤如下：

（1）确定所应使用的公式；

（2）选取节点，并求出系数 A_k；

（3）列表计算；

（4）估计误差。

3　例　给定积分$\int_{0.5}^1\sqrt{x}\,dx$，试分别用梯形求积公式、辛卜生求积公式及牛顿——柯特斯求积公式，进行数值计算。准确到10^{-5}。

解　运用梯形公式，取节点 $x_0=\frac{1}{2}$，$x_1=1$，得

$$\int_{0.5}^1\sqrt{x}\,dx\doteq\frac{0.5}{2}[\sqrt{0.5}+\sqrt{1}]=0.42678$$

运用辛卜生公式，取节点 $x_0=\frac{1}{2}$，$x_1=0.75$，$x_2=1$，得

$$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}\,dx \doteq \frac{0.5}{6}[\sqrt{0.5}+4\sqrt{0.75}+\sqrt{1}]=0.43093$$

运用牛顿——柯特斯公式，取节点 $x_0=\frac{1}{2}$，$x_1=0.625$，$x_2=0.75$，$x_3=0.875$，$x_4=1$，得

$$\begin{aligned}\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}\,dx &\doteq \frac{0.5}{90}[7\sqrt{0.5}+32\sqrt{0.625}+12\sqrt{0.75}+\\ &\quad +32\sqrt{0.0875}+7\sqrt{1}]\\ &=0.43096\end{aligned}$$

事实上，此积分的准确值为

$$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}\,dx=\frac{2}{3}\left.x^{\frac{3}{2}}\right|_{0.5}^{1}\doteq 0.43096441$$

4　几点说明

（1）在运用辛卜生公式解决立体的体积问题时，要注意定理1的条件，即 $s(x)$ 是不高于三次的代数多项式。

（2）梯形求积公式和辛卜生求积公式是最简单的、常用的求积公式。读者必须牢牢地掌握，并要求会运用它们解题。这一点，对于从事初等数学教学工作的读者更为重要。

（3）在应用辛卜生公式解决具体问题时，一定要注意，坐标系的选取要适中。否则，会增加很多计算量。

§4　复化公式

1　例　计算积分 $\int_0^1 e^x dx$，若用复化梯形公式，问积分区间要多少等分，才能保证其结果有五位有效数字？

解　由估计式（4.2）$R_n(f)=-\frac{(b-a)}{12}h^2f''(\eta)$ 和 $\frac{1}{n}=h$，

得

$$R_n(f)=-\frac{(b-a)}{12n^2}f''(\eta),\ \eta\in[a,b]$$

由于 $f(x)=e^x$，$f''(x)=e^x$，又 $b-a=1$，当 $0<x<1$ 时，有 $|f''(x)|<e$，故

$$|R_n(f)|\leqslant\frac{e}{12n^2}$$

由于$\int_0^1 e^x dx$ 的真值具有一位整数，所以，要使积分的近似值有五位有效数字，n 必须满足

$$|R_n(f)|\leqslant\frac{e}{12n^2}\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-4}$$

或 $\qquad 6n^2\geqslant e\times10^4$

两边取以10为底的对数，得

$$\lg6+2\lg n\geqslant4+\lg e$$

整理，得

$$\lg n\geqslant\frac{4+\lg e-\lg6}{2}=1.8281$$

只要取$n=67$即可，即将区间[0,1]分67等分即满足要求。

2　在应用辛卜生公式时，注意，分点标记 $n=2m$，即 $n+1$为奇数个节点，偶数个间距。

3　例　分别用复化梯形公式和复化辛卜生公式计算积分

$$I=\int_1^2 x^2\ln(x+1)dx,\ 取\ n=8$$

解　由 $n=8$，得

$$h=\frac{2-1}{8}=0.125$$

列表计算如下

n	x_i	x_i^2	$ln(1+x_i)$	$x_i^2 ln(1+x_i)$	梯形公式	辛卜生公式
0	1.00000	1.00000	0.69315	0.69315	1	1
1	1.12500	1.26563	0.75377	0.95400	2	4
2	1.25000	1.56250	0.81093	1.26708	2	2
3	1.37500	1.89063	0.86500	1.63539	2	4
4	1.50000	2.25000	0.91629	2.06165	2	2
5	1.62500	2.64063	0.96508	2.54842	2	4
6	1.75000	3.06250	1.01160	3.09803	2	2
7	1.87500	3.51563	1.05605	3.71269	2	4
8	2.00000	4.00000	1.09861	4.39445	1	1
Σ	—	—	—	—	35.64212	53.34312
I	—	—	—	—	2.22763	2.22263

所以，运用复化梯形公式，得

$$I=\int_1^2 x^2 ln(x+1)dx \doteq 2.22763$$

运用复化辛卜生公式，得

$$I=\int_1^2 x^2 ln(x+1)dx \doteq 2.22263$$

4 关于自动积分法.

（1） 从上面介绍的几种数值积分公式中可以看出，它们的截断误差是随着 n 的增长而减少的。但对于一个具体的积分问题，确定一恰当的数 n，使得到的积分近似值 I_n 与其真值 I 之间的差落在允许的误差范围内，则需要计算被积函数的高阶导数. 因此，这种作法一般是很困难的. 而自动积分法正是较好地解决了这一问题.

（2） 自动积分法是在积分计算的过程中，根据规定的精度要求，自动地确定数 n，并算出满足精度要求的积分近似值，而不需要事先进行人工分析的一种方法，这在电子计算机

上是很容易实现的。它的基本思想，就是在计算积分时，将区间逐次分半进行计算，然后，利用前后两次计算的结果进行误差估计。

§ 5　龙贝格公式

1　学习本节的关键在于深刻地体会数值方法中的加速收敛技巧的基本思想，掌握李查逊外推算法。因为这是建立龙贝格求积公式的基础，实际上，李查逊外推算法是数值方法中的加速技巧的理论化，而龙贝格求积公式则是李查逊外推算法的一个具体运用。龙贝格求积公式是以复化梯形求积公式为基础，在李查逊外推算法中，设 $F_1(h)=T_1$，$F_{n+1}(h)=T_{n+1}(h)$，并取 $q=\dfrac{1}{2}$，从而得到新序列

$$S_{2^k}=\frac{4T_{2^k}-T_{2^{k-1}}}{4-1}$$

然后，又经过了辛卜生公式及柯特斯公式的推导而得到的。所以，读者必须首先掌握好李查逊外推算法。

2　关于用序列 $\{F_{m+1}(h)\}$ 逼近 F^* 的误差估计，在一般情况下，有如下定理：

若 $F(h)$ 逼近于 F^* 的截断误差由

$$\begin{aligned}R[F^*]&=F^*-F(h)\\&=a_1h^{p_1}+a_2h^{p_2}+\cdots+a_kh^{p_k}+\cdots\end{aligned}\qquad(1)$$

给出，那么，由

$$\begin{cases}F_1(h)=F(h)\\F_{m+1}(h)=\dfrac{F_m(qh)-q^{p_m}F_m(h)}{1-q^{p_m}}\end{cases}\qquad(m=1,2,\cdots\qquad(2)$$

所定义的 $F_{m+1}(h)$ 逼近于 F^* 的误差为

$$F^*-F_{m+1}(h)=a_{m+1}^{(m+1)}h^{p_{m+1}}+a_{m+2}^{(m+1)}h^{p_{m+2}}+\cdots$$

其中，$a_k^{(m+1)}$ 为与 h 无关的常数 $(k \geqslant m+1)$；$1-q^{p_m} \neq 0$ $(m=1,2,\cdots)$；$p_k > p_{k-1} > \cdots > p_2 > p_1 > 0$。

证明 运用数学归纳法进行。

当 $m=1$时，由（2）式有

$$F_2(h)=\frac{F_1(qh)-q^{p_1}F_1(h)}{1-q^{p_1}}=\frac{F(qh)-q^{p_1}F(h)}{1-q^{p_1}}$$

又因为，若在（1）式中，以qh代h，有

$$F^*-F(qh)=a_1(qh)^{p_1}+a_2(qh)^{p_2}+\cdots+a_k(qh)^{p_k}+\cdots$$

用 q^{p_1}乘（1）式两边，得

$$q^{p_1}[F^*-F(h)]=q^{p_1}(a_1h^{p_1}+a_2h^{p_2}+\cdots+a_kh^{p_k}+\cdots)$$

这里，q 为满足 $1-q^{p_1} \neq 0$ 的适当正数。现将上述二式相减，得

$$\begin{aligned}&(1-q^{p_1})F^*-[F(qh)-q^{p_1}F(h)]\\&=a_2(q^{p_2}-q^{p_1})h^{p_2}+\cdots+a_k(q^{p_k}-q^{p_1})h^{p_k}+\cdots\end{aligned}$$

即

$$\begin{aligned}&F^*-\left[\frac{F(qh)-q^{p_1}F(h)}{1-q^{p_1}}\right]\\&=a_2\frac{q^{p_2}-q^{p_1}}{1-q^{p_1}}h^{p_2}+\cdots+a_k\frac{q^{p_k}-q^{p_1}}{1-q^{p_1}}h^{p_k}+\cdots\\&=a_2^{(2)}h^{p_2}+\cdots+a_k^{(2)}h^{p_k}+\cdots\end{aligned}$$

其中

$$a_2^{(2)}=a_2\frac{q^{p_2}-q^{p_1}}{1-q^{p_1}},\ \cdots,\quad a_k^{(2)}=a_k\frac{q^{p_k}-q^{p_1}}{1-q^{p_1}},\ \cdots$$

都是与 h 无关的数。

所以，当 $m=1$ 时，定理成立。

假设 $m=k-1$时，定理成立，往证，当 $m=k$时，定理亦成立。

因为当 $m=k-1$时，定理成立，所以，有

$$\begin{aligned}F^*-F_k(h)=a_k^{(k)}h^{p_k}+a_{k+1}^{(k)}h^{p_{k+1}}+\\+a_{k+2}^{(k)}h^{p_{k+2}}+\cdots\end{aligned}\qquad(3)$$

这里 $a_j^{(k)}$ 与 h 无关($j\geqslant k$)，另外，在上式中，以 qh 代 h，有

$$F^* - F_k(qh) = a_k^{(k)} h^{p_k} q^{p_k} + a_{k+1}^{(k)} h^{p_{k+1}} q^{p_{k+1}} + \\ + a_{k+2}^{(k)} h^{p_{k+2}} q^{p_{k+2}} + \cdots$$

上述二式相减，并除以 $(1 - q^{p_k})$，得

$$\frac{F_k(qh) - F_k(h)}{1 - q^{p_k}} = a_k^{(k)} h^{p_k} + \frac{a_{k+1}^{(k)}(1 - q^{p_{k+1}})}{1 - q^{p_k}} h^{p_{k+1}} + \\ + \frac{a_{k+2}^{(k)}(1 - q^{p_{k+2}})}{1 - q^{p_k}} h^{p_{k+2}} + \cdots$$

将（3）式减去这个式子，便有估计式

$$F^* - \left[\frac{F_k(qh) - q^{p_k} F_k(h)}{1 - q^{p_k}}\right] = a_{k+1}^{(k+1)} h^{p_{k+1}} + \\ + a_{k+2}^{(k+1)} h^{p_{k+2}} + \cdots$$

这里 $a_{k+1}^{(k+1)}$，$a_{k+2}^{(k+1)}$，…皆与 h 无关．由于

$$\frac{F_k(qh) - q^{p_k} F_k(h)}{1 - q^{p_k}} = F_{k+1}(h)$$

所以，当 $m = k$ 时，定理亦成立．证完．

3　关于 § 5 中（5.2）式

$$\lim_{h \to 0} T(h) = \int_a^b f(x) dx = T(0)$$

证明如下：

设函数 $f(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上可积．由函数可积定义知，对于区间 $[a,b]$ 上的任意一个分割 T 以及在由分割 T 所得到的任一小区间 Δx_i 中，任取一点 ξ_i 所得到的积分和，有下式成立

$$\lim_{\lambda(T) \to 0} \sum_{i=1}^{n} f(\xi_i) \Delta x_i = \int_a^b f(x) dx$$

其中　$\lambda(T) = \max\limits_{1 \leqslant i \leqslant n} \Delta x_i$，　$\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$

把 $T(h)$ 写成如下形式

$$T(h) = \frac{1}{2}\left\{\frac{(b-a)}{n}[f(x_0) + f(x_1) + \cdots + f(x_{n-1})] + \right.$$

$$+\frac{(b-a)}{n}[f(x_1)+f(x_2)+\cdots+f(x_n)]\}$$

$$=\frac{1}{2}\left\{\sum_{i=0}^{n-1} f(x_i)\frac{(b-a)}{n}+\sum_{i=1}^{n} f(x_i)\frac{(b-a)}{n}\right\}$$

$$=\frac{1}{2}[S_{n-1}+S_n] \qquad (4)$$

其中

$$S_{n-1}=\sum_{i=0}^{n-1} f(x_i)\ \frac{b-a}{n}$$

$$S_n=\sum_{i=1}^{n} f(x_i)\ \frac{b-a}{n}$$

S_{n-1} 与 S_n是 $f(x)$在$[a,b]$ 上的两个积分和。它是将$[a,b]$分成 n 等份，设每一个小区间为 Δx_i，其长度为 h 。在 Δx_i上取其左端点 x_{i-1} 作为 ξ_i，可得到积分和 S_{n-1}，若在 Δx_i上取其右端点 x_i 作为 ξ_i，则得到积分和 S_n。

又因为当 $n\to\infty$时，$\lambda(T)=\frac{b-a}{n}=h\to 0$，故，由积分定义知，（4）式右端为

$$\lim_{h\to 0}T(h)=\lim_{h\to 0}\frac{1}{2}(S_{n-1}+S_n)$$

$$=\lim_{h\to 0}\frac{1}{2}\ S_{n-1}+\lim_{h\to 0}\frac{1}{2}S_n$$

$$=\int_a^b f(x)dx$$

（4）式左端为

$$T(0)=\int_a^b f(x)dx$$

故 $$T(0)=\int_a^b f(x)dx$$ 证完。

4　在用龙贝格公式求定积分的近似值时，并不需要必须算到 R_{kk}，只要在计算中满足

$$|T_{2^k}-T_{2^{k-1}}|<\varepsilon$$
$$|S_{2^k}-S_{2^{k-1}}|<\varepsilon$$
$$|R_{2^k}-R_{2^{k-1}}|<\varepsilon$$

上述三种情况之一，计算就可停止。

§ 6 高斯求积公式

1 高斯求积公式是在$[-1,1]$上进行讨论的，如果对一般区间$[a,b]$，就必须经过变换

$$x=\frac{b+a}{2}+\frac{b-a}{2}t$$

将在$[a,b]$上的求积问题转化为$[-1,1]$上的积分问题，然后应用高斯求积公式。

2 关于定理 3 的详细推导。

定理 3 设函数$f(x)$在$[-1,1]$上有$2n$阶导数$f^{(2n)}(x)$，且$f^{(2n)}(x)$在$[-1,1]$上连续，则高斯求积公式的余项为

$$R(f)=\frac{2^{2n+1}}{2n+1}\frac{(n!)^4}{[(2n)!]^3}f^{(2n)}(\eta)\qquad -1<\eta<1$$

分析 该定理的证明方法基本上与辛卜生求积公式的余项的推导方法相似。为了推出所要求的余项，根据高斯求积公式具有$2n-1$次代数精确度这一特点，若能把被积函数$f(x)$表示成一个$2n-1$次多项式与另一个余项的和，由辛卜生求积公式余项的推导方法知，即可根据积分中值定理推出所要求的余项。

证明 以n个高斯节点为插值节点，构造$f(x)$的$2n-1$次爱尔米特插值多项式。所以，$f(x)$可表示成

$$f(x)=H(x)+\frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!}\omega^2(x)\tag{1}$$

其中$\xi\in(-1,1)$，$H(x)$为$2n-1$次爱尔米特多项式，

$$\omega(x)=(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n)。$$

对（1）式，求从-1到1的定积分，得

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx-\int_{-1}^{1} H(x)dx$$

$$=\frac{1}{(2n)!}\int_{-1}^{1} f^{(2n)}(\xi)\omega^2(x)dx \qquad (2)$$

因为高斯求积公式具有$2n-1$次代数精确度，而$H(x)$为$2n-1$次多项式，故，若对$\int_{-1}^{1} H(x)dx$运用高斯公式计算，有

$$\int_{-1}^{1} H(x)dx=\sum_{k=1}^{n} A_k H(x_k) \qquad (3)$$

又由爱尔米特插值的特点，知

$$H(x_k)=f(x_k) \quad (k=1,2,\cdots,n)$$

故，（3）式可表示为

$$\int_{-1}^{1} H(x)dx=\sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$$

将上式代入（2）式，得

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx-\sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$$

$$=\frac{1}{(2n)!}\int_{-1}^{1} f^{(2n)}(\xi)\omega^2(x)dx$$

对于上式右端的积分，因为$\omega^2(x)$在$[-1,1]$上不变号，$f^{(2n)}(x)$在$[-1,1]$上连续，所以，由积分中值定理知，在$[-1,1]$中至少有一点η，使

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx-\sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$$

$$=\frac{f^{(2n)}(\eta)}{(2n)!}\int_{-1}^{1} \omega^2(x)dx \qquad (4)$$

但

$$\omega(x) = \frac{2^n(n!)^2}{(2n)!}P_n(x)$$

为首项系数是1的勒让德多项式，且考虑到它的正交性，有

$$\int_{-1}^{1}\omega^2(x)\,dx=\left[\frac{2^n(n!)^2}{(2n)!}\right]^2\int_{-1}^{1}P_n^{\,2}(x)dx$$

$$=\left[\frac{2^n(n!)^2}{(2n!)}\right]^2\frac{2}{2n+1}$$

将上式代入（4）式右端，得

$$R(f)=\int_{-1}^{1}f(x)dx-\sum_{k=1}^{n}A_kf(x_k)$$

$$=\frac{2^{2n+1}}{2n+1}\cdot\frac{(n!)^4}{[(2n)!]^3}f^{(2n)}(\eta)\quad(-1<\eta<1)$$

即

$$R(f)=\frac{2^{2n+1}}{2n+1}\cdot\frac{(n!)^4}{[(2n)!]^3}f^{(2n)}(\eta)\qquad(-1<\eta<1)$$

证完。

3　应用高斯求积公式解题时，其节点和系数不要具体计算，可直接查高斯求积公式节点、系数表。

例　用四点高斯求积公式计算

$$\int_0^1\frac{\lg(1+x)}{1+x^2}dx\qquad(\text{准确到}10^{-4}\text{位})$$

解　首先将区间[0,1]化为[-1,1]，由

$$x=\frac{1}{2}+\frac{1}{2}t,\quad 有\quad dx=\frac{1}{2}dt$$

则

$$I=\int_0^1\frac{\lg(1+x)}{1+x^2}dx=\frac{1}{2}\int_{-1}^{1}\frac{\lg\left(\frac{3}{2}+\frac{1}{2}t\right)}{1+\frac{1}{4}(1+t)^2}dt$$

$$\doteq\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{4}A_if(x_i)$$

列表计算如下：

n	t_k	$(1+t_k)^2$	$\frac{1}{1+0.25(1+t_k)^2}$	$lg\left(\frac{3}{2}+\frac{t_k}{2}\right)$	A_k	$A_k f(x_k)$
1	0.86114	3.46384	0.53592	0.28569	0.34786	0.05326
2	0.33998	1.79555	0.69018	0.22271	0.65215	0.10024
3	-0.33998	0.43563	0.90179	0.12385	0.65215	0.07284
4	-0.86114	0.01928	0.99520	0.02915	0.34786	0.01009
					$I\approx\frac{1}{2}\Sigma$ $=0.11822$	

由于 $I\doteq0.11822$ 知，$m=-1$ 故，有

$$m-p+1=-4$$

即
$$-1-p+1=-4$$
$$p=4$$

故
$$I=\int_0^1\frac{lg(1+x)}{1+x^2}dx\doteq0.1182$$

另外，还有几点说明：

1　高斯求积公式的系数 $A_k=\frac{2}{1-x_k^2}\left\{\frac{\omega(1)}{\omega'(x_k)}\right\}^2$ $(k=1,2,\cdots,n)$ 与 $f(x)$ 无关。

2　高斯求积公式的节点是非等距的，而且它恰好是在 $[-1,1]$ 上的勒让德多项式的根。所以，高斯节点是固定的，但要注意，一定是在 $[-1,1]$ 区间上适用。

3　运算时与节点取的先后顺序无关。但节点与所对应的系数一定要保持不变。

4　在所要求构造的求积公式中，若有 n 个待求的未知数（未知系数与未知节点的个数的和），那么，所构造的求积公式至少有 $n-1$ 次代数精确度。

5　为避免求系数所带来的困难，可用一常数及某些特定

节点，而得到具有较高精度的切比雪夫求积公式

$$\int_a^b f(x)dx \doteq \frac{2}{n}\sum_{i=1}^{n} f(x_i) \qquad (-1 \leqslant x_i \leqslant 1)$$

下面给出切比雪夫公式当 $n=2、3、4、5$时的节点：

$n=2$	$-t_1=t_2\approx 0.557735$
$n=3$	$-t_1=t_3\approx 0.709107$ $t_2=0.000000$
$n=4$	$-t_1=t_4\approx 0.794655$ $-t_2=t_3\approx 0.187592$
$n=5$	$-t_1=t_5\approx 0.832497$ $-t_2=t_4\approx 0.374541$ $t_3=0.000000$

四 复习思考题

1 对于积分$\int_0^1 f(x)\,dx$，若取节点$x_0=\frac{1}{5}$、$x_1=\frac{1}{2}$、$x_2=\frac{4}{5}$，试推导一个内插求积公式，并用这个公式求$\int_0^1 e^x dx$的值.

2 证明 当n为偶数时，求积公式

$$\int_a^b f(x)\,dx \doteq \sum_{k=0}^{n} A_k y_k$$

的代数精确度能达到 $n+1$ 次。

其中 $A_k=(b-a)C_k^{(n)}$

$$C_k^{(n)}=\frac{(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!n}\int_0^n \prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n}(t-j)dt$$

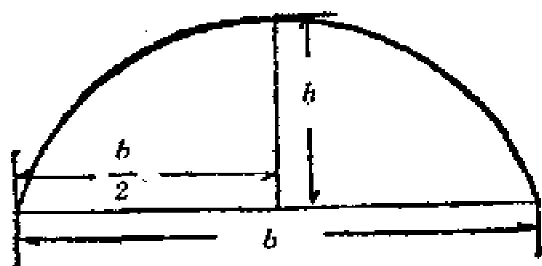


图　5.2

3　用辛卜生公式推导出弓形面积的近似公式，具体如图5.2.

（1）　$S \doteq \frac{2}{3}bh$;

（2）　$S \doteq \frac{2}{3}bh + \frac{h^3}{2b}$.

4　求构造高斯型求积公式

$$\int_0^1 \sqrt{x} f(x)dx \doteq A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2)$$

的系数 A_1、A_2 及节点 x_1、x_2.

5　选取内插求积公式

$$\int_0^h f(x)dx \doteq \frac{h}{2}[f(0) + f(h)] + ah^2[f'(0) - f'(h)]$$

中的常数 a，使该求积公式的精度尽量高．并估计误差.

五　本 章 小 结

为了读者复习方便，把本章所讨论的求积公式归纳成下表：

名　　称	积分区间	节　点	系　数 A_k
内插求积公式	$[a, b]$	任　意　取	$A_k=\int_a^b \frac{\omega(x)}{(x-x_k)\omega'(x_k)}dx$
牛顿—柯特斯公式	$[a, b]$	等　　距	$A_k=\frac{(b-a)(-1)^{n-k}}{nk!(n-k)!}\int_0^n \frac{t(t-1)\cdots(t-n)}{t-k}dt$
梯形公式	$[a, b]$	a, b	$\frac{1}{2}(b-a)$,　$\frac{1}{2}(b-a)$
辛卜生公式	$[a, b]$	$a, \frac{a+b}{2}, b$	$\frac{(b-a)}{6}$,　$\frac{4(b-a)}{6}$,　$\frac{(b-a)}{6}$,
复化梯形公式	$[a, b]$	等　　距	$A_k=\begin{cases}1 & (k=0, n)\\ 2 & (k=1,2\cdots,n-1)\end{cases}$
复化辛卜生公式	$[a, b]$	等　　距	$A_k=\begin{cases}1 & (k=0, n)\\ 4 & (k=1, 3, \cdots, n-1)\\ 2 & (k=2, 4, \cdots, n-2)\end{cases}$
高斯公式	$[-1, 1]$	勒让德多项式的根	$A_k=\frac{2}{1-x_k^2}\left\{\frac{\omega(1)}{\omega'(x_k)}\right\}^2$　$k=1, 2, \cdots, n$
龙贝格公式	$[a, b]$	等距，逐次分半	

求积公式	余项R(f)
$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$	$R_n(f) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \int_a^b \omega(x)dx$
$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} f(x_0+kh)$	$n=2m$, $R_n(f) = \frac{f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!} \int_a^b x\omega(x)dx$ $n=2m+1$, $R_n(f) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \int_b^a \omega(x)dx$
$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{(b-a)}{2}[f(a)+f(b)]$	$R(f) = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\eta)$
$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{(b-a)}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]$	$R(f) = -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\eta)$
$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{(b-a)}{2n}\left[f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k)+f(b)\right]$	$R_n(f) = -\frac{(b-a)}{12} h^2 f''(\eta)$

$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{(b-a)}{3n}\left[f(a) + 4\sum_{k=1}^{m} f(x_{2k-1}) + 2\sum_{k=1}^{m-1} f(x_{2k}) + f(b) \right]$ 其中$n=2m$	$R_n(f) = -\frac{(b-a)}{180}h^4 f^{(4)}(\eta)$
$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$	$R(f) = \frac{2^{2n+1}}{2n+1} \cdot \frac{(n!)^4}{[(2n)!]^3} f^{(2n)}(\eta)$
$T_1 = \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$ $T_{2^k} = \frac{1}{2} T_{2^{k-1}} + \frac{b-a}{2^k} \sum_{i=1}^{3^{k-1}} f\left[a + \frac{b-a}{2^k}(2i-1) \right]$ $S_{2^k} = \frac{4T_{2^k} - T_{2^{k-1}}}{4-1}$ $k=1,2,\cdots,$ $C_{2^k} = \frac{4^2 S_{2^k} - S_{2^{k-1}}}{4^2-1}$, $k=2,3\cdots$ $R_{2^k} = \frac{4^3 C_{2^k} - C_{2^{k-1}}}{4^3-1}$, $k=3,4\cdots$	

第六章　常微分方程数值解法学习指导

一　主 要 内 容

本章是讨论解常微分方程的数值方法。主要讨论两个方面的问题。

（一）一阶常微分方程的初值问题，即

$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dx}=f(x,y) \\ y|_{x=x_0}=y_0 \end{cases}$$

在区间$[a,b]$上的解。

（二）二阶常微分方程边值问题，即

$$\begin{cases} y''+p(x)y'+q(x)y=f(x) \\ y(a)=\alpha,\ \ y(b)=\beta \end{cases}$$

在区间$[a,b]$上的解。

重点讨论第一方面的问题。

我们讨论的数值解法，它不是求方程的解的解析表达式或近似表达式。而是直接求一列离散点 $x_i(i=1,2,\cdots,n)$ 上的函数值 $y(x_i)$ 的近似值 y_i。对于常微分方程，虽然关于某些典型的微方分程介绍了一些求解析解的基本方法，但在很多情形下，都不可能给出解的解析表达式。即便能够求出，也往往因为计算量大，不易使用。

例如，容易求出初值问题

$$\begin{cases} y'=\dfrac{1}{1+x^2}-y \\ y(0)=0 \end{cases}$$

的解 $y=e^{-x}\int_0^x \frac{e^t}{1+t^2}dt$，但要计算它的值还需应用数值积分的方法。

又例如

$$\begin{cases} y'=(y+x)^2 \\ y(0)=0 \end{cases}$$

其解为 $y=\mathrm{tg}x-x$，虽有表可查，但表上没有给出的 $\mathrm{tg}x$ 的值还要利用插值方法来计算。

数值解法的优点在于用它可以直接求出具有任意精确度的数值解。本章所介绍的一些主要方法是适用于广泛一类微分方程的一般方法。

二 基 本 要 求

学习这一章，要了解微分方程数值解法的研究内容，要掌握构成方法的基本思想及其各方法的异同点。要注意方法的特点，能应用各主要方法解题。

本章对于所给出的方法，将要叙述和讨论三个问题。

（一）构造差分格式。

（二）讨论解法的收敛性及误差估计。即对差分格式，讨论当步长 $h\to 0$ 时，是否有 $\varepsilon_n=|y(x_n)-\widetilde{y}_n|\to 0$，其中 $\widetilde{y}_n$ 为差分方程准确解，$y(x_n)$ 为微分方程的准确解。

（三）方法的稳定性。这里主要讨论所给方法在求解过程中对初始误差的传播及由于误差传播对求解的影响。即 $e_n=|\widetilde{y}_n-y_n|$。其中 y_n 为差分方程的近似解。

关于稳定性，本章重点对尤拉法和改进尤拉法做了讨论，其他方法，只给出一般结论。

三 内 容 分 析

§2 尤拉法与改进尤拉法

1 构造尤拉法和改进尤拉法可以用不同的方法。本文所采用的方法是，将初值问题

$$\begin{cases} y' = f(x,y) \\ y|_{x=x_0} = y_0 \end{cases}$$

化成其等价形式

$$y(x+h) = y(x) + \int_x^{x+h} f(t, y(t))dt$$

然后用矩形公式，梯形公式代替右端的积分部分，并用 y_i 近似代替 $y(x_i)$，即得到尤拉法及改进尤拉法。这是数值积分的方法。也可以用泰勒展式法，即将 $y(x)$ 在 $x=x_n$ 处展开，有

$$y(x_n+h) = y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2}y''(\xi_{n+1})$$

$$(x_n < \xi_{n+1} < x_{n+1})$$

略去最后一项，并且注意 $y_n \doteq y(x_n)$，$y_{n+1} \doteq y(x_{n+1})$ 便得到尤拉公式。

若在泰勒展式中取前三项

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2}y''(x_n) + O(h^3)$$

其中取

$$y''(x_n) \doteq \frac{y'(x_{n+1}) - y'(x_n)}{h}$$

即用差商代替导数，便可得到改进的尤拉公式，

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2} \cdot \frac{y'(x_{n+1}) - y'(x_n)}{h}$$

$$= y_n + \frac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})]$$

2　初值问题

$$\begin{cases} y' = f(x,y) & (2.1) \\ y(x_0) = y_0 & (2.2) \end{cases}$$

是与

$$y(x) = y_0 + \int_{x_0}^{x} f[t, y(t)]dt \qquad (2.4)$$

等价的。

证明　因为由(2.1)、(2.2)到(2.4) 是显然的，而对(2.4)两边对 x 求导，得

$$y'(x) = f[x, y(x)]$$

即(2.1) 式。又在(2.4) 式中令 $x = x_0$，可得(2.2)式。证完。

3　尤拉法的局部截断误差。由(2.6)式知，$R_{n+1} = y(x_{n+1}) - y(x_n) - hf[x_n, y(x_n)]$。对于 (2.7) 式，当 $y_n = y(x_n)$ 时，有 $y_{n+1} = y(x_n) + hf[x_n, y(x_n)]$。而 $R_{n+1} = y(x_{n+1}) - y_{n+1}$，即为精确解 $y(x_{n+1})$ 与由尤拉法差分格式在上一步 $y_n = y(x_n)$ 精确成立的条件下求出的 y_{n+1} 的局部截断误差，可以理解为一步误差。即它不考虑前边若干步用 y_i 代替 $y(x_i)$ 引起的误差对求 y_{n+1} 的影响，或者假设前若干 y_i 为精确。这种误差也叫方法误差。

4　方法的阶数可以做为衡量方法精确度的一个重要标志。由阶数的定义可知，若初值问题 (2.1) ～ (2.2) 的真解 $y = y(x)$ 为次数不超过 P 的多项式时，差分格式精确成立。若真解为超过 P 次的多项式，一般不精确成立，称此方法为 P 阶方法。

如尤拉法，其局部截断误差为 $R_{n+1} = \frac{h^2}{2} y''(\xi_n)$，记为 $O(h^2)$。若真解 $y(x)$ 为一次多项式时，$R_{n+1} = 0$。故尤拉法为一阶的。由阶数定义可知，局部截断误差若为 $O(h^{p+1})$，则方法为 P 阶。即方法的阶正好比截断误差中 h 的幂次少 1 。当 h 很小时，h 的幂次越高，局部截断误差越小，逼近程度越好。

5　尤拉法是比较粗糙的。多用于求 x_0 附近的 x_i 的函数值。由(2.7) 式：

$$y_{n+1}=y_n+hf(x_n,y_n) \qquad (n=0,1,2,\cdots)$$

当 $n=0$ 时，即为

$$y_1=y_0+hf(x_0,y_0)$$

这恰是积分曲线在(x_0,y_0)处的切线方程。

当 $n=1$ 时，为

$$y_2=y_1+hf(x_1,y_1)$$

一般(x_1,y_1)并不是积分曲线上的点。计算y_2，可以分为两步。第一，它用切线代替曲线。第二，在切线方程中又用 y_1 代替 $y(x_1)$。较之计算y_1时多一次近似。如果 i 较大，计算的步数较多，只要图形的曲率不改变，则计算出的 y_n 值离开 $y(x_n)$ 将会愈来愈远。若 h 取的较大，由 $R_{n+1}=\frac{h^2}{2}y''(\xi_{n+1})$知，误差也很大。

尤拉法的两个特点，第一，它不够精确。第二，使用比较简便，适于用其确定初值或表头。

6　尤拉法与改进尤拉法在计算和使用上是有区别的。在尤拉法中，$y_{n+1}=y_n+hf(x_n,y_n)$的右端都为已知，即用已经计算出的量来表示，为显式方法。而改进的尤拉法为隐式方法。在 $y_{n+1}=y_n+\frac{1}{2}h[f(x_n,y_n)+f(x_{n+1},y_{n+1})]$ 的右端还含有 y_{n+1} 这样的待求量。用此式不能直接求出 y_{n+1}，要用迭代法来求解。

用迭代法求解步骤：当$n=0$时，可求y_{K+1} $(K=0,1,2\cdots)$。

第一次迭代

$$\begin{cases} y_{k+1}^{(0)}=y_k+hf(x_k,y_k) \\ y_{k+1}^{(1)}=y_k+\frac{h}{2}[f(x_k,y_k)+f(x_{k+1},y_{k+1}^{(0)})] \end{cases}$$

第二次迭代

$$y_{k+1}^{(1)}=y_k+\frac{h}{2}[f(x_k y_k)+f(x_{k-1},y_{k+1}^{(1)})]$$

可以反复迭代到满足精度要求为止，即

$$|y_{k+1}^{(k+1)}-y_{k+1}^{(k)}|<\varepsilon$$

改进尤拉法为二阶方法，较之尤拉法精确度高。但进行迭代时，运算量较大，一般只迭代二、三次，就可达到精度要求。有时只迭代一次，其结果便作为 y_{n+1}。这时计算公式为

$$\begin{cases} y_{n+1}^{(0)}=y_n+hf(x_n,y_n) \\ y_{n+1}^{(1)}=y_n+\frac{1}{2}h[f(x_n,y_n)+f(x_{n+1},y_{n+1}^{(0)})] \end{cases}$$

这类公式也叫预报校正公式．常常用它来确定开头的几点值。

例　对初值问题

$$\begin{cases} y'=(y+x)^2 \\ y(0)=0, \qquad x=0(0.2)0.6 \end{cases}$$

用预报校正公式求解．

解　预报校正公式为

$$y_{n+1}^{(0)}=y_n+hf(x_n,y_n)$$

$$y_{n+1}=y_n+\frac{1}{2}h[f(x_n,y_n)+f(x_{n+1},y_{n+1}^{(0)})]$$

$n=0$，$x_1=0.2$　得　$y_1^{(0)}=0$

$y_1^{(1)}=0.004$

$n=1$，$x_2=0.4$　得　$y_2^{(0)}=0.0123$

$y_2^{(1)}=0.02516$

$n=2$，$x_3=0.6$　得　$y_3^{(0)}=0.0618$

$y_3^{(1)}=0.08696$

此初值问题的精确解为

$$y=\mathrm{tg}x-x$$

其相应的值为

$$y_1 = 0.00271$$

$$y_2 = 0.02279$$

$$y_3 = 0.08413 \qquad \text{(准确到} 10^{-5}\text{)}$$

§3 收敛性与稳定性

1 利用数值方法求解常微分方程的初值问题，所求数值解为y_{n+1}，其与方程(2.1) ～ (2.2)的真解 $y(x_{n+1})$有误差。误差来源包括，截断误差、初值误差及在计算过程中的舍入误差。讨论这些误差及其传播对计算结果的影响，即收敛性和稳定性的问题。这是由于

$$\begin{aligned} y(x_{n+1}) - y_{n+1} &= y(x_{n+1}) - \widetilde{y}_{n+1} + \widetilde{y}_{n+1} - y_{n+1} \\ &= \varepsilon_{n+1} + e_{n+1} \end{aligned}$$

ε_{n+1} 为整体误差，关于它的讨论即收敛性。而 e_{n+1} 为舍入误差，关于它的讨论即稳定性的问题。为了简化问题，在讨论收敛性时，不考虑初值及舍入误差。在讨论稳定性时，也不比较 y_n 与微分方程的真解 $y(x_n)$的关系。

2 相容性。由定义可知，相容性对方法的要求是初步的。收敛的稳定的方法一定满足相容性。仅满足相容性，还不能够断定方法的收敛与稳定。一个方法具有相容性，且初值稳定，则该方法收敛。因此相容性可以做为判断收敛的必要条件。

相容性的概念应该这样理解。设方程的真解为 $y(x)$.若差分格式为

$$y_{n+1} = y_n + h\cdot\phi(x_n, y_n, h)$$

其中 $\phi(x_n, y_n, h)$ 为方法的增主函数。若 $y(x)$在极限情形下满足差分格式，即当 $h\to0$ 时，对求解区间的任一固定 x，存在极限关系

$$\lim_{h\to 0}\frac{y(x+h)-y(x)}{h}=\lim_{h\to 0}\phi(x,y(x),h)$$

即 $$f(x,y)=\lim_{h\to 0}\phi(x,y,h)=\phi(x,y,0)$$

则称此差分格式与问题(2.1) ～(2.2) 相容。

设差分格式为 P阶，则

$$y(x+h)-y(x)=h\phi(x,y,h)+O(h^{p+1})$$

两端同除 h 后取极限

$$\lim_{h\to 0}\frac{y(x+h)-y(x)}{h}=\lim_{h\to 0}\phi(x,y,h)+\lim_{h\to 0}\frac{1}{h}O(h^{p+1})$$

所以必须有$\lim_{h\to 0}O(h^p)=0$。由此知 p 必为正数，p 又为阶数，故 p 至少应为 1 。所以 ($p\geq 1$) 阶的差分格式与 (2.1)～(2.2) 是相容的。

3　整体误差和局部截断误差的概念要清楚．局部截断误差是假设前 $y_i(i=0,1,2\cdots,n)$ 为方程的精确解的前题下，由差分格式求出的 y_{n+1} 与初值(2.1)～(2.2)的真解之间的差。而整体误差 ε_n，为(2.1) 式的真解 $y(x_{n+1})$ 与差分格式的真解 $\widetilde{y}_{n+1}$之差，即

$$\varepsilon_{n+1}=y(x_{n+1})-\widetilde{y}_{n+1}$$
$$\widetilde{y}_{n+1}=\widetilde{y}_n+hf(x_n,\widetilde{y}_n)$$

其中$\widetilde{y}_i(i=0,1,2,\cdots,n)$ 均为 $y(x_i)$ 的近似值．由此看到，整体误差包含各局部截断误差，同时还包含了前若干步的局部截断误差在逐步计算中的积累。

由此可知，作为误差估计，最根本的是估计整体误差。

直接估计整体误差 $\varepsilon_{n+1}=y(x_{n+1})-\widetilde{y}_{n+1}$不容易。因此推导出局部截断误差和整体截断误差的关系，就可以利用局部截断误差来估计整体误差，本节定理 1 的作用即在于此。

4　$(1+hL)^n\leqslant(1+hL)^n<e^{(b-a)L}$的推导

因为$N=\frac{b-a}{h}$，而 $n\in[0,1,2,\cdots,N]$，$hL>0$，

$$(1+hL)>1$$

故

$$(1+hL)^n \leqslant (1+hL)^N = (1+hL)^{\frac{b-a}{h}}$$

$$= (1+hL)^{\frac{1}{hL}(b-a)L}$$

而

$$\lim_{h\to 0}(1+hL)^{\frac{1}{hL}(b-a)L} = e^{(b-a)L}$$

由$(1+n)^{\frac{1}{n}}$的单调性知

$$(1+hL)^{\frac{1}{hL}(b-a)L} < e^{(b-a)L}$$

故有　$(1+hL)^n \leqslant (1+hL)^N < e^{(b-a)L}$

5　稳定性的概念

本节所讨论的稳定性问题，分为二种情形。一是一般稳定性的概念，二是绝对稳定性的概念。在绝对稳定中，又有条件稳定和无条件稳定的区别。

一般稳定性是在 $h\to 0$ 的条件下，讨论差分格式是否满足不等式

$$|e_n| = |\widetilde{y}_n - y_n| \leqslant C|\widetilde{y}_0 - y_0|$$

即如果初始误差的传播和积累对于任何小的步长都保持一致有界，那么差分格式是稳定的。一般稳定性可以通过取极限的办法来讨论。

在实际计算中，步长越小，截断误差越小，但步长小，步数要多，引起舍入误差的积累要大，因此步长要取得适当。为此引入稳定性中的绝对稳定的概念。

绝对稳定是指在步长 h 为固定的条件下，

$$|e_n| = |\widetilde{y}_n - y_n|$$

不增或逐渐减少的情形。它不仅要求 e_n 有界，而且要求 $e_n \leqslant C|\widetilde{y}_0 - y_0|$，其中常数 C，$|C|\leqslant 1$。

绝对稳定由两方面决定。一是微分方程形式本身，二是方法。一个微分方程本身是不稳定的，那么用任何方法求解它，都不会稳定。只有方程稳定，方法不稳定也不行。因此要求方程是稳定的，方法也要稳定（而一般稳定性概念与方程本身形式无关）。例如，本节给出结论，尤拉法是稳定的，那么它适用于任何方程。而对绝对稳定性，若不同的方程，同时使用尤拉法，那么，有些差分格式绝对稳定，有些则相反。

为了简化问题，在讨论绝对稳定性时，不论方程本身形式如何，都以模型方程

$$\begin{cases} y' = Ay \quad (A\text{为复数}) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

代替原方程进行讨论。如果一个数值方法对如此简单的方程还不是绝对稳定的，就难以用它来解一般方程的初值问题。当然，对一个数值方法，对模型方程是绝对稳定，也不一定对一般方程绝对稳定。但用模型方程在一定程度上反映了数值方法的某些特性。

在实际计算时，要始终注意满足稳定性的要求。可以求其绝对稳定域，限制 h 的选取，以保证满足稳定性的要求。

例 对(2.5)中的积分用辛卜生公式，便得

$$y_{n+1} = y_{n-1} + \frac{h}{3}(f_{n+1} + 4f_n + f_{n-1}) \qquad (1)$$

试讨论用公式（1）解初值问题

$$\begin{cases} y' = -y \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

的绝对稳定性。

解 由 $y' = -y$，故此计算格式为

$$y_{n+1} = y_{n-1} + \frac{h}{3}(-y_{n+1} - 4y_n - y_{n-1})$$

亦即 $$\left(1 + \frac{h}{3}\right)y_{n+1} + \frac{4}{3}hy_n - \left(1 - \frac{h}{3}\right)y_{n-1} = 0$$

设e_0，e_1，为由y_0、y_1引起且在以后的计算中没有误差。故误差方程为

$$\left(1+\frac{h}{3}\right)e_{1+n}+\frac{4}{3}he_n-\left(1-\frac{h}{3}\right)e_{n-1}=0$$

此为二阶线性差分方程，其特征方程为

$$\varphi(\lambda)=\left(1+\frac{h}{3}\right)\lambda^2+\frac{4}{3}h\lambda-\left(1-\frac{h}{3}\right)=0$$

$$\varphi(-2)=4\left(1+\frac{h}{3}\right)-\frac{8}{3}h-\left(1-\frac{h}{3}\right)=3-h>0$$

（设$h<3$）

$$\varphi(-1)=\left(1+\frac{h}{3}\right)-\frac{4}{3}h-1+\frac{h}{3}=-\frac{2}{3}h<0$$

$$\varphi(0)=-1+\frac{h}{3}<0$$

$$\varphi(1)=1+\frac{h}{3}+\frac{4}{3}h-1+\frac{h}{3}=2h>0$$

故$\varphi(\lambda)$存在二实根，λ_1，λ_2，并且有下式成立

$$-2<\lambda_1<-1,\quad 0<\lambda_2<1$$

因此差分方程的通解为

$$e_n=\alpha\lambda_1^n+\beta\lambda_2^n$$

其中α、β为与n无关的常数。由于$|\lambda_1|>1$，若$\alpha\neq 0$，则对足够小的步长$\bar{h}$，e_n趋于无穷大即对于初值问题

$$\begin{cases} y'=-y \\ y(0)=1 \end{cases}$$

应用公式（1），对任何$\bar{h}$都不是绝对稳定的。

6　关于差分方程的求解问题

表达式

$$F(x,f(x),\Delta f(x),\cdots,\Delta^n f(x)]=0 \tag{1}$$

称为未知函数的差分方程，其中$\Delta f^k(x)=\Delta^{k-1}f(x+1)-\Delta f^{k-1}(x)$。方程（1）中各阶差分若用函数值表示则为：

$$\phi[x, f(x), f(x+1), \cdots, f(x+n)] = 0 \qquad (2)$$

关于方程的分类，解的结构，差分方程与微分方程有很多类似之处。

差分方程

$$\Delta^k f(x) + a_1(x)\Delta^{k-1} f(x) + \cdots + a_k(x) f(x) = Q(x) \quad (3)$$

是 k 阶线性方程。其中$Q(x)$，$a_i(x)$是关于 x 的函数。若$Q(x)$ $\equiv 0$，则称方程为齐次的，若 $Q(x) \neq 0$，则称为非齐的。

若（3）中a_i均为常数，则称为常系数线性方程。

例 求常系数齐次线性方程

$$f(x+k) + a_1 f(x+k-1) + a_2 f(x+k-2) + \cdots + a_k f(x) = 0 \qquad (4)$$

解 设（4）的解具有以下形式

$$f(n) = \lambda^n \qquad (\lambda \neq 0)$$

代入（4）中得

$$\lambda^{n+k} + a_1\lambda^{n+k-1} + a_2\lambda^{n+k-2} + \cdots + a_k\lambda^n = 0$$

因为 $\lambda \neq 0$，故可得

$$\lambda^k + a_1\lambda^{k-1} + a_2\lambda^{k-2} + \cdots + a_k = 0 \qquad (5)$$

（5）式叫差分方程（4）的特征方程。方程（5）的根，称为特征根。若方程（5）的 k 个根 λ_1，λ_2，$\cdots$，λ_k 为互异实数，则λ_1^n，$\lambda_2^n, \cdots, \lambda_k^n$ 是线性无关的。（5）的通解可表示为：

$$f(n) = C_1\lambda_1^n + C_2\lambda_2^n + \cdots + C_n\lambda_k^n$$

其中常数C_1，C_2，$\cdots$，C_k 可由初始条件加以确定。若特征根为实重根，例如设 λ_1 为其S重实根，则方程（4）的解可以表示成

$$f(n) = (C_1 + C_2 n + \cdots + C_{S-1} n^{S-1})\lambda_1^n + C_{S+1}\lambda_{S+1}^n + \cdots + C_k\lambda_k^n$$

7　本节例题(3.10)式，为关于n的二阶线性常系数齐次方程，其特征方程为

$$\lambda^2 - 2hA\lambda - 1 = 0$$

设λ_1，λ_2为其根，则差分方程的通解为

$$e_n = \alpha\lambda_1^n + \beta\lambda_2^n$$

求出λ_1，λ_2即可。其中α、β可由初值条件定出。

§4 龙格—库塔法

1 泰勒级数法与龙格库塔法都可以根据预先确定的阶数，灵活选定差分格式。两种方法依据的都是泰勒公式。它们的局部截断误差的阶数相同。泰勒级数法，当导数次数高时，计算量较大。龙格——库塔法避免了计算高阶导数，而利用不同点上的一阶导数的线性组合，构造出具有高精度的方法。

如例4，求解$y' = x^2 + y^2$，利用泰勒级数法，差分格式为

$$y_{n+1} = y_n + hf_n + \frac{1}{2}h^2 f'_n + \frac{1}{6}h^3 f''_n$$

其中求f'、f''所含运算较多，计算量大。而用三阶龙格——库塔公式

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 4k_2 + k_3)$$

其中k_1，k_2，k_3用（4.11）计算。只要分别计算三个结点上的$f(x, y)$的值，较之台劳级数法能减少运算。

2 使用泰勒级数法与龙格——库塔法，应注意公式与解的光滑程度必须相适应。因为上述两种以泰勒展开为基础的方法，要用高阶方法，须以$y(x)$存在高阶导数为前题。当$y(x)$是充分光滑的，那么方法的阶越高越好，结果越精确。若$y(x)$不存在高阶导数，一般可用尤拉法与改进的尤拉法。

一般高阶方法不常使用，因为计算量太大。上述方法一般用来确定初值或多步法的开头几个值，即"表头"。

3 龙格——库塔法中，步长可以任意取定。在计算过程

中，根据各结点 $y=y(x)$ 的变化情况与需要的精确度，可适当改变步长，而不是选取高阶方法。

4 这里给出一种误差估计方法。这种方法对任何数值解法公式都适用。

对于误差估计，我们是利用

$$y(x_n) \doteq y_{nh} + A_n h^{S+1} \quad (1)$$

$$y(x_{n+1}) \doteq y_{(n+1)h} + 2A_n h^{S+1} \quad (2)$$

…………………………………

$$y(x_{n+k}) \doteq y_{(n+k)h} + KA_n h^{S+1} \quad (k)$$

此处 A_n 与 h 无关。当 A_n 随 n 变化得很慢，并且当 h 很小时以上公式是成立的。

具体推导，只要从 x_{n-1} 分 k 步（步长为 h）算出 $y(x_{n+k})$ 的近似值 $y_{(n+k)}$ 即得(k)式。

以（2）式为例，将 $y(x_{n+1})$ 在 x_n 点展开为幂级数，便得

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2} y''(x_n) + \cdots$$

$$+ \frac{h^S}{S!} y^{(S)}(x_n) + \frac{h^{S+1}}{(S+1)!} y^{(S+1)}(\xi) \quad (3)$$

令 $$A_n = \frac{y^{(S+1)}(\xi)}{(S+1)!}$$

然后将 $y^{(k)}(x_n)$ $(k=0,1,2,\cdots,s)$ 分别在 x_{n-1} 点展开为幂级数，并略去含 $y^{(S+2)}(x_n)$ 以后的项，即得，

$$y(x_n) = y(x_{n-1}) + hy'(x_{n-1}) + \frac{h^2}{2!} y''(x_{n-1}) + \cdots$$

$$+ \frac{h^{S+1}}{(S+1)!} y^{(S+1)}(\xi)$$

$$y'(x_n) = y'(x_{n-1}) + hy''(x_{n-1}) + \frac{h^2}{2!} y'''(x_{n-1}) + \cdots$$

$$+ \frac{h^S}{s!} y^{(S+1)}(x_{n-1})$$

$$y''(x_n)=y''(x_{n-1})+hy'''(x_{n-1})+\frac{h^2}{2!}y^{4}(x_{n-1})+\cdots$$

$$+\frac{h^{S-1}}{(S-1)!}y^{(S+1)}(x_{n-1})$$

……………………………………………………

$$y^{(S-1)}(x_n)=y^{(S-1)}(x_{n-1})+hy^{S}(x_{n-1})+$$

$$+\frac{h^2}{2!}y^{(S+1)}(x_{n-1})$$

$$y^{(S)}(x_n)=y^{(S)}(x_{n-1})+hy^{(S+1)}(x_{n-1})$$

将上述结果代入（3）中归纳整理后，便得

$$y(x_{n+1})\doteq\left[\left(y_n+hy'_n+\frac{h^2}{2!}y''_n+\frac{h^3}{3!}y'''_n+\cdots\right.\right.$$

$$\left.\left.+\frac{h^S}{S!}y_n^{(S)}\right)+\frac{h^{S+1}}{(S+1)!}y^{(S+1)}(\xi)\right]$$

$$+\frac{h^{S+1}}{(S+1)!}y^{(S+1)}(\xi)$$

令 $$y_{n+1}=y_n+hy'_n+\frac{h^2}{2!}y''_n+\frac{h^3}{3!}y'''_n+\cdots+\frac{h^S}{S!}y_n^{(S)}$$

则 $$y(x_{n+1})=y_{n+1}+2\frac{h^{S+1}}{(S+1)!}y^{(S+1)}(\xi)$$

$$=y_{n+1}+2A_nh^{S+1}$$

即推得（2）式。仿此可得上述不等式，并利用其估计误差。

§5 线性多步法

1 构造插值多项式，首先要确定插值节点。被插值点最好在插值点之间。但对给定的初始条件，往往容易利用其他方法，逐点求出 $y(x_0)$，$y(x_1)$，$y(x_2)$，…。因此一般利用 x_{i-3}，x_{i-2}，x_{i-1} 作为插值点求 $y(x_i)$。

由于节点选取不同，可分为不同方法。例如求 y_{n+1}，可利用 x_{n-3}，x_{n-2}，x_{n-1}，x_n，也可以利用 x_{n-2}，x_{n-1}，

x_n，x_{n+1}，利用牛顿后插公式，选取前一组作为插值点，即得阿达姆斯外推法。后者，即为阿达姆斯内插法。

2　注意在插值中利用的是牛顿后插多项式，即为等距节点的情形。所以步长为固定的，一般中途不易改变步长。

3　在阿达姆斯内插法中，要求 h 满足下式：

$$\left|\frac{dF(y_{n+1})}{dy_{n+1}}\right| = \frac{3}{8}h\ \frac{2f(x_{n+1},\ y_{n+1})}{\partial y_{n+1}} < 1$$

这是因为在第二章 §5 中关于一般迭代法的收敛条件中，要求$0<\rho<1$（$\rho=\max|\varphi'(x)|, a\leqslant x\leqslant b$），故上述不等式成立，迭代程序才收敛。

4　当 $k=3$ 时，外推公式余项为

$$k_{n+1} = \frac{251}{720}h^5 y^{(5)}(\xi) = O(h^5)\ (x_{n-3}<\xi<x_n)$$

的推导。

解　由于牛顿后插多项式 $f_n(x_n+th)$ 的余项为

$$r_k(f,x) = \frac{h^{k+1}f^{(k+1)}(\xi)}{(k+1)!}t(t+1)\cdots(t+k) \quad (6.11)$$

其中　$t=\dfrac{x_0-x_n}{h}$，　$x_{n-3}<\xi<x_n$。故阿达姆斯外推公式余项为

$$R_k(x) = \int_0^1 \frac{h^{k+1}f^{(k+1)}(\xi)}{(k+1)!}t(t-1)\cdots(t+k)\cdot hdt$$

$$= h^{k+2}\int_0^1 \frac{f^{(k+1)}(\xi)}{(k+1)!}t(t+1)\cdots(t+k)dt$$

当 $k=3$ 时

$$y(x_{n+1}) - y_{n+1}^{(1)} = R_3$$

$$= h^5\int_0^1 \frac{f^{(k+1)}(\xi)}{4!}\ t(t+1)(t+2)(t+3)dt$$

$$= h^5 y^5(\xi)\cdot\frac{1}{24}\cdot\int_0^1 (t^4+6t^3+11t^2+6t)dt$$

$$=\frac{1}{24}\cdot\frac{251}{30}\cdot h^5y^{(5)}(\xi)$$

$$=\frac{251}{720}h^5y^{(5)}(\xi)$$

仿此可推出 $k=2$ 时，阿达姆斯内插法的截断误差为

$$R_2=-\frac{19}{720}h^5y^{(5)}(\xi)\quad(x_{n-2}<\xi<x_{n+1})$$

5　在选用阿达姆斯公式时，若其截断误差为 $O(h^p)$，那么用来计算前几个 y_i 的单步法的截断误差至少也要 $O(h^p)$。否则可能因前几个 y_i 不准确，而影响多步法的效果。

6　下面介绍一种使用阿达姆斯公式，在计算过程中的误差估计方法。

在计算过程中，假定在点 x_n 及以前各点上 y_k 的值都是准确的，且 $y^{(5)}(x)$ 变化不大。我们可以利用内插公式与外插公式得到的 $y_{n+1}^{(0)}$ 与 y_{n+1}，去估计近似值 y_{n+1} 对于精确解 $y(x_{n+1})$ 的误差。

差分格式为

$$y_{n+1}^{(0)}=y_n+\frac{h}{24}\{55f_n-59f_{n-1}+37f_{n-2}-9f_{n-3}\}\quad(1)$$

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{24}\{9f(x_{n+1},y_{n+1}^{(0)})+19f_n-5f_{n-1}+f_{n-2}\}\quad(2)$$

而在点 x_{n+1} 上的准确解

$$y(x_{n+1})=y_n+\frac{h}{24}\{55f_n-59f_{n-1}+37f_{n-2}-9f_{n-3}\}+\frac{251}{720}h^5y^{(5)}(\xi_1)\quad(x_{n-3}<\xi<x_n)\quad(3)$$

$$y(x_{n+1})=y_n+\frac{h}{24}\{9f(x_{n+1},y(x_{n+1}))+9f_n-5f_{n-1}++f_{n-2}\}-\frac{19}{720}h^5y^{(5)}(\xi_2)$$

$$(x_{n-2} < \xi_2 < x_{n+1}) \tag{4}$$

由（3）减（1）得

$$y(x_{n+1}) - y_{n+1}^{(0)} = \frac{251}{720} h^5 y^{(5)}(\xi_1) \tag{5}$$

由（4）减（2）得

$$y(_{n+1}) - y_{n+1} = \frac{9}{24} h\{f(x_{n+1}, \ y(x_{n+1}))$$

$$-f(x_{n+1}, y_{n+1})\} - \frac{19}{720} h^5 y^{(5)}(\xi_1) \tag{6}$$

由假设可认为 $y^{(5)}(\xi_1) \doteq y^{(5)}(\xi_2)$，又设 h 充分小使

$$\frac{9h}{24} |f(x_{n+1}, y(x_{n+1})) - f(x_{n+1}, y_{n+1})|$$

$$\leqslant \frac{3hL}{8} |y(x_{n+1}) - y_{n+1}|$$

可以忽略不计，于是由（5）减（6）便得

$$y_{n+1} - y_{n+1}^{(0)} \doteq -\frac{270}{270} h^5 y^{(5)}(\xi_2)$$

代入（6），就有

$$y(x_{n+1}) - y_{n+1} \doteq \frac{19}{720}(y_{n+1} - y_{n+1}^{(0)}) \tag{7}$$

在计算过程中，可根据（7）看结果是否达到了所要求的精确度。如果尚不满足，就缩小步长再计算。

例　对初值问题

$$\begin{cases} y' = 4x - 2y \\ y(0) = 0, \end{cases}$$

$x = 0(0.1)0.5$

用阿达姆斯法求其数值解。

解　用泰勒公式法求其表头

$y_1 = 0.01873$，　$y_2 = 0.07032$，　$y_3 = 0.14880$

又　$f_0 = 0$，　$f_1 = y'_1 = 0.36254$

$f_2 = y'_2 = 0.65936$，　$f_3 = y'_3 = 0.9024$

由 $$y_4 = y_3 + \frac{0.1}{24}(55\times f_3 - 59\times f_2 + 37\times f_1)$$

得 $$y_4 = 0.24939$$

又 $$f_4 = y'_4 = 1.10120$$

计算得

$$y_5 = y_4 + \frac{0.1}{24}(55\times f_4 - 59\times f_3 + 37\times f_2 - 9\times f_1)$$

$$= 0.36797$$

该初值问题的真解为

$$y = 2x - 1 + e^{-2x}$$

取到 10^{-4} 位，则为

$$y_1 = 0.0187,\ y_2 = 0.0703$$

$$y_3 = 0.1488,\ y_4 = 0.2493$$

$$y_5 = 0.3679$$

§6 解二阶常微分方程边值问题的差分法

1 在定理(6.1) 的条件中，要求下式成立，$-b_n \geqslant a_n + c_n + \rho_n(\rho_n > 0)$。若存在 $\rho_n > 0$，且满足不等式 $-b_n \geqslant a_n + c_n + \rho_n$，则二阶差分方程有唯一解。且当 $h \to 0$ 时，收敛于相应微分方程的真解。做题时要验证有无满足条件的 ρ_n 存在。

2 关于差分方程的收敛性及误差估计。方程

$$y'' + P(x)y' + q(x)y = f(x) \quad (1)$$

可做如下变形，将上式两端乘以$e^{\int p(x)dx}$即得

$$(y' e^{\int p(x)dx})' + q e^{\int p(x)dx} y = f(x)\cdot e^{\int p(x)dx}$$

令

$$t = \int e^{-\int p dx} dx \equiv \phi(x)$$

则方程（1）就化为

$$\frac{d^2y}{dt^2} + Q(t)y = R(t)$$

容易验证，在这种变换下，边值条件的形状不变，因此下面考虑线性的情况时，可以假设方程中不包含 y'。

设 y_i^* 为微分方程

$$y'' - p(x)y = r(x) \qquad (p(x)\geqslant 0,\ a<x<b)$$

在点 x_i 处的精确解($i=1,2,\cdots,n-1$)。即方程组

$$\left.\begin{aligned} & y(x_{i-1}) - (2+p_ih^2)y(x_i) + y(x_{i+1}) \\ & \qquad = r_ih^2 + \frac{h^4}{12}\theta_iM_4 \\ & y(x_0)=\alpha,\ y(x_n)=\beta,\ i=1,2,\cdots,n-1 \end{aligned}\right\} \tag{1}$$

的精确解，此处 $|\theta_i|\leqslant 1$，$M_4=\max|y^{(4)}(x)|$，$x_0\leqslant x\leqslant x_n$，$x_0=a$，$x_n=b$，$h=\dfrac{b-a}{n}$。

设 $\overline{y_i}$ 为差分格式

$$\left.\begin{aligned} & y_{i-1} - (2+ph^2)y_i + y_{i+1} = r_ih^2 \\ & y_0=\alpha,\ y_n=\beta,\ i=1,\ 2,\ \cdots,\ n-1 \end{aligned}\right\} \tag{2}$$

的精确解.

现证明当 $h\to 0$，$\overline{y_i}\to y_i^*$。先把（1）、（2）写成向量的形式。设

$$y^*=(y_1^*,\ y_2^*\cdots,\ y_{n-1}^*)'$$

$$Q=(\theta_1,\ \theta_2,\ \cdots,\theta_{n-1})'$$

$$r=(r_1h^2+\alpha,\ r_2h^2,\ \cdots,r_{n-2}h^2,\ r_{n-1}h^2-\beta)'$$

$$A=\begin{pmatrix} -2-P_1h^2 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2-P_2h^2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -2-P_3h^2 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & & 1 & -2-P_{n-1}h^2 \end{pmatrix}$$

则（1）可写为

$$Ay^*=r+\frac{h^4}{12}M_4\theta \tag{3}$$

同样，设 $\overline{y}=(\overline{y}_1,\ \overline{y}_2,\cdots,\ \overline{y}_{n-1})'$

则（2）可写为

$$A\bar{y}=r \tag{4}$$

由（3）减（4）得

$$A(y^*-\bar{y})=\frac{h^4}{12}M_4\theta \tag{5}$$

因为　$A=C-h^2\theta$，其中

$$C=\begin{pmatrix}-2 & 1 & 0\cdots & 0\\ 1 & -2 & 1\cdots & 0\\ 0 & 1 & -2\cdots & 0\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ 0 & 0 & 0\cdots & -2\end{pmatrix},\quad \theta=\begin{pmatrix}\theta_1 & & & 0\\ & \theta_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \theta_{n-1}\end{pmatrix}$$

当 h 充分小时，可取 $A\doteq C$，这时把（5）可换为

$$C(u^*-u)=\frac{M_4}{12}h^4\theta \tag{6}$$

显然

$$\|y^*-\bar{y}\|\doteq\|u^*-u\|$$

从而

$$\|y^*-\bar{y}\|\leqslant\frac{M_4}{12}h^4\|C^{-1}\|\,\|\theta\| \tag{7}$$

这就是所求的误差估计式。

特别是因 $\|C^{-1}\|=\dfrac{n^2-1}{8}$（当 $n-1$ 为偶数时），$\|\theta\|_1=1$，故

$$\|y^*-\bar{y}\|_1\leqslant\frac{M_4}{12}h^4\,\frac{n^2-1}{8}=\frac{M_4h^4(n^2-1)}{96} \tag{8}$$

至于格式（2）的收敛性，不难由（8）得，

$$\|y^*-\bar{y}\|_1\leqslant\frac{M_4[h^2(b-a)^2-h^4]}{96}$$

当 $h\to0$ 时，$y\to y^*$ 即 $y_i\to y_i^*$。

四 复习思考题

1 一阶常微分方程 $y' = -Ay$（A为常数 $A>0$）的通解为

$$y(x) = Ce^{-Ax}$$

其中C为任意常数，（由初值确定），于是$y\to 0$时（当 $x\to+\infty$），用尤拉法解这个方程，当固定步长 h 时，能否得到 $y_n\to 0(n\to\infty)$？

2 讨论改进尤拉法的稳定性。

3 给定常微分方程初值问题

$$\begin{cases} y' = f(x, y) & (a\leqslant x\leqslant b) \\ y(a) = y_0 \end{cases}$$

其中 $f(x, y)$是 $a\leqslant x\leqslant b$，$|y|<\infty$上的充分光滑函数。

（a）求向后的尤拉法公式。

（b）针对方程 $y' = \lambda y$，$R_e\lambda<0$，λ是复常数，讨论这方程的稳定性范围。

（c）说明这方法的优缺点。

4 证明求解常微分方程初值问题

$$y' = f(x, y), \qquad y(a) = y_0$$

的变形尤拉法

$$y_{n+1} = y_n + hf[x_n + \frac{1}{2}h,\quad y_n + \frac{1}{2}hf(x_n,\ y_n)]$$

是二阶龙格—库塔法，又如用此法于

$$y' = -10y,\ y(0) = y_0$$

为保证数值计算的绝对稳定性，问对h应加什么限制？

5 对初值问题

$$\begin{cases} y' = xy + x \\ y(0) = 0 \qquad x = 0(0.1)0.5 \end{cases}$$

先求其表头，然后用阿达姆斯法继续求以后各值。

五　本章小结

（一）本章讨论了常微分方程的初值问题及二阶常微分方程边值问题的求解问题。关于一阶常微分方程初值问题的几种解法，都可以平行地推广到方程组的情形。例如，

设已给出的方程组和初始条件

$$
\begin{cases}
\dfrac{dy}{dx}=f(x,y,z), & y(x_0)=y_0 \\
\dfrac{dz}{dx}=g(x,y,z), & z(x_0)=z_0
\end{cases}
$$

这组方程等价于积分方程组

$$
\begin{cases}
y(x)=y_0+\displaystyle\int_{x_0}^{x} y'(t)dt \\
z(x)=z_0+\displaystyle\int_{x_0}^{x} z'(t)dt
\end{cases}
$$

故可以通过方程组

$$
\begin{cases}
y_{n+1}=y_n+\displaystyle\int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(t)dt \\
z_{n+1}=z_n+\displaystyle\int_{x_n}^{x_{n+1}} z'(t)dt
\end{cases}
$$

求其数值解。由此可以根据各方法推出解方程组的相应差分格式。

（二）关于步长的选择，一般说来，步长越大，截断误差越大。步长小，截断误差亦小。但是步长取得小，计算的步数要增加，计算量大，而且引起舍入误差的积累增加。舍入误差对步长的要求与截断误差对步长的要求恰好相反，如图 6.1。

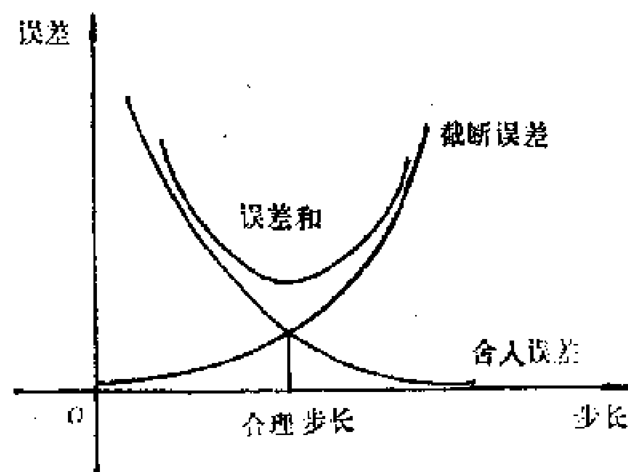


图 6.1

这两个要求互相矛盾，必须兼顾，要注意取满足稳定性要求的步长 h。

第三部分　计算方法习题解答

第一章　误差习题解答

习　　题 1.3

1　**解**　由于 $\frac{22}{7}=3.142857$，而

$$\left|\frac{22}{7}-\pi\right|=0.0012644893\cdots<0.0013$$

$$|3.14-\pi|=0.00159\cdots<0.0016$$

所以 $\Delta 3.14=0.0016$，$\Delta\frac{22}{7}=0.0013$，于是有

$$\Delta\frac{22}{7}<\Delta 3.14$$

这说明，用$\frac{22}{7}$代替 π 比用3.14代替 π 的精度高。

2　**解**　因为这三个数都给出了绝对误差界，即

$\Delta a=\Delta 225=1$，　$\Delta b=\Delta 2.25=0.01$，　$\Delta c=\Delta 0.00225=0.00001$ 显然，对于三个不同的近似数仅用其绝对误差的大小去衡量它们的精度是有困难的，则必须用其相对误差的大小才能比较这三个数精度的高低．由于

$$\delta 225=\frac{1}{225},\ \delta 2.25=\frac{1}{225},\ \delta 0.00225=\frac{1}{225}$$

可见，这三个近似数的相对误差都是一样的，这说明它们的精度一样高，即不同近似数的相对误差与近似数小数点的位置无关。

3　**解**　由于近似数一个是1.15米，而另一个是3.45尺，

显然这两个近似数的度量单位不同，则用相对误差去衡量它们的精度。因为

$$\Delta 1.15 \leqslant 0.005\ (\text{米})\ ,\ \Delta 3.45 \leqslant 0.005\ (\text{尺})$$

所以

$$\delta 1.15 = \frac{0.005}{1.15} \doteq 0.00435 < 0.44\%$$

$$\delta 3.45 = \frac{0.005}{3.45} \doteq 0.00145 < 0.15\%$$

由于

$$\delta 1.15 > \delta 3.45$$

这说明用市尺量得的桌长准确些，这是因为市尺比米尺的最小单位刻度小的缘故。

4 **解** 因为 $\Delta 20 \leqslant 0.012$ (mm)，若设直径的准确值为 d，则

$$\Delta 20 = |d - 20| \leqslant 0.012$$

即为 $\quad 20 - 0.012 \leqslant d \leqslant 20 + 0.012$

所以合格品的直径范围是$19.99 \leqslant d \leqslant 20.012$(mm)。

5 **解** 因为$\sqrt{10} = 3.162\cdots$，故近似数 a 的第一个有效数字$x_1 = 3$，由（3.10）式得

$$\delta a \leqslant \frac{1}{10^3} \leqslant \frac{1}{2(x_1+1)} 10^{-(p-1)} = \frac{1}{2(3+1)\cdot 10^{p-1}}$$

取满足上式最大的 p，即 $p=3$ 时就达到要求。取 $a = \sqrt{10} \doteq 3.16$。

6 **解** 因为$\frac{355}{113} = 3.14159292\cdots$，$\pi = 3.1415926\cdots$，所以

$$\left| \pi - \frac{355}{113} \right| = 0.0000003\cdots < 0.0000005 = \frac{1}{2} 10^{-6}$$

即

$$\Delta \frac{355}{113} = \frac{1}{2} 10^{-6}$$

故知近似数有效到10^{-6} 位上。取 3.141593为π的具有七位有效数字的近似数。

此题也可用下法确定p，因为$m=0$，则，

$$m-p+1=-p+1=-6,\ 即p=7$$

它说明近似数$\frac{355}{113}$具有七个有效数位。即有效到 10^{-6} 数位上，故取3.141593。

7　**证明**　因为x有n个有效数字，所以

$$\Delta x \leqslant \frac{1}{2}10^{m-n+1}$$

又因为

$$\delta x=\frac{\Delta x}{|x|}\leqslant \frac{\frac{1}{2}10^{m-n+1}}{|x|}$$

而　　$x_1\times 10^m \leqslant x < (x_1+1)10^m$

所以

$$\delta x \leqslant \frac{\frac{1}{2}10^{m-n+1}}{x_1\cdot 10^m}=\frac{1}{2x_1}\cdot 10^{-(n-1)}\leqslant \frac{1}{2}\cdot 10^{-(n-1)}$$

即

$$\delta x \leqslant \frac{1}{2}\cdot 10^{-(n-1)}$$，证完。

8　**证明**　因为$x_1=1,2,\cdots,9$，所以

$$\frac{10}{x_1+1}\geqslant 1$$

由已知条件

$$\delta x \leqslant \frac{1}{2}\cdot 10^{-p}\leqslant \frac{1}{2}\cdot\frac{10}{(x_1+1)}10^{-p}\leqslant \frac{1}{2(x_1+1)}\cdot 10^{-(p-1)}$$

所以

$$\delta x \leqslant \frac{1}{2(x_1+1)}\cdot 10^{-(p-1)}$$

由定理 2 知，x至少有p个有效数字（位）。证完。

9　**证明**　因为

$$\delta a > \frac{1}{2} \cdot 10^{-(n+2)}$$

由定理 1 的推论知 a 含有的有效数位的个数不超过$n+2$个。

又因为

$$\delta a \leqslant \frac{1}{2} \cdot 10^{-(n-1)} \leqslant \frac{1}{2(x_1+1)} \cdot 10^{-(n-2)} =$$

$$= \frac{1}{2(x_1+1)} \cdot 10^{-[(n-1)-1]}$$

应用第 8 题的结果知，a 的有效数位的个数至少有$n-1$个，综上所证，可以得出a 的有效数位的个数可为：

$n-1$，n，$n+1$，$n+2$　个

因定理及推论均在严格条件下证得的，没有一般性，在通常情况下，取$n-1$或n为适宜。

习　　题 1·4

1　解　设二数为 x_1, x_2，其近似数为 a_1, a_2。

（1）和的绝对误差界

设 $f(x_1, x_2) = x_1 + x_2$，则由（4.1）得和的绝对误差界

$$\Delta f = \Delta a_1 + \Delta a_2$$

（2）差的绝对误差界

设 $f(x_1, x_2) = x_1 - x_2$，则由（4.1）得差的绝对误差界

$$\Delta f = \Delta a_1 + \Delta a_2$$

（3）积的绝对误差界

设 $f(x_1, x_2) = x_1 \cdot x_2$，则由（4.1）得积的绝对误差界

$$\Delta f = a_2 \Delta a_1 + a_1 \Delta a_2$$

（4）商的绝对误差界

设 $f(x_1, x_2) = x_1 / x_2$，则由（4.1）得商的绝对误差界为

$$\Delta f = \frac{1}{a_2} \Delta a_1 + \frac{a_1}{a_2^2} \Delta a_2$$

2　解　（1） $f(x)=\frac{1}{n}\sin(n^2x)$，$x\doteq 0$；在绝对误差意义下，由于

$$f'(x)=n\cos(n^2x)$$

故在$x\doteq 0$时，$(n\to\infty)$其条件数为∞，所以在$x=0$点附近将是坏条件的。

（2） $\lg x$，$x\doteq 1$；由于

$$(\lg x)'=\frac{1}{x}\ln x$$

而在相对误差意义下的条件数为：

$$\left|\frac{x(\lg x)'}{\lg x}\right|_{x=1}=\left|\frac{\lg e}{\lg x}\right|_{x=1}=\infty$$

故在 $x=1$ 附近时计算是坏条件的。

3　解　（1） 将算式变形为

$$\lg x_1-\lg x_2=\lg\frac{x_1}{x_2}=\lg a$$

其中　$a=x_1/x_2$

（2） 同样，把算式变形为

$$\frac{1-\cos x}{\sin x}=\frac{1-\cos^2x}{\sin x(1+\cos x)}=\left|\frac{\sin x}{1+\cos x}\right|_{x=2°}$$

$$\doteq\frac{0.0349}{1+0.9994}\doteq 0.0175$$

（3） 因为当x充分大时，$arctg(x+1)-arctgx$ 是两个相近的近似数作差，所以应把算式变形，令

$$arctg(x+1)=y,\ arctgx=z$$

则　$\operatorname{tg}y=x+1$，$\operatorname{tg}z=x$

于是有

$$arctg(x+1)-arctgx=y-z$$

因为

$$\operatorname{tg}(y-z)=\frac{\operatorname{tg}y-\operatorname{tg}z}{1+\operatorname{tg}y\cdot\operatorname{tg}z}=\frac{x+1-x}{1+x(x+1)}=\frac{1}{1+x(x+1)}$$

所以

$$y-z=arctg(x+1)-arctgx=arctg\frac{1}{1+x(x+1)}$$

（4）首先把算式变形为.

$$10^7(1-\cos x)=2\times10^7\sin^2\frac{x}{2}$$

因为$x=2°$，所以$\frac{x}{2}=1°$，查表得$\sin\frac{x}{2}=\sin1°=0.0175$.

所以

$$10^7\ (1-\cos x)=2\times10^7\sin^2\frac{x}{2}=2\times10^7\sin^2 1°$$

$$\doteq2\times10^7(0.0175)^2\doteq6125$$

4 解（1）此题完全与第一章§4（三）例3一样，读者可按例3进行讨论.

（2）1° 建立积分的递推关系式

因为

$$S_0=\int_0^1\frac{1}{x+5}dx=ln(x+5)\Big|_0^1=ln6-ln5$$

$$S_1=\int_0^1\frac{x}{x+5}dx=\int_0^1\left(\frac{x+5x^0}{x+5}-\frac{5}{x+5}\right)dx$$

$$=\int_0^1\frac{x+5x^0}{x+5}dx-5(ln6-ln5)$$

$$=\int_0^1\frac{x+5x^0}{x+5}dx-5S_0$$

于是有

$$S_1+5S_0=\int_0^1\frac{x+5x^0}{x+5}dx$$

容易推得

$$S_n + 5S_{n-1} = \int_0^1 \frac{x^n + 5x^{n-1}}{x+5} dx = \int_0^1 x^{n-1} dx = \frac{1}{n}$$

于是可建立下列关系式

表 1

i	S_i值
0	0.182322
1	0.088392
2	0.058089
3	0.043387
4	0.034306
5	0.028469
6	0.024324
7	0.021238
8	0.018811
9	0.017057
10	0.014717
11	0.017325
12	− 0.003290
13	− 0.093374
14	− 0.395442
15	2.043878
16	−10.156890
17	50.843276
18	−254.16082
19	1270.8567
20	−6354.2338

表 2

i	S_i值
20	0.007830
19	0.008254
18	0.008870
17	0.009336
16	0.009898
15	0.010520
14	0.011229
13	0.012040
12	0.012977
11	0.014071
10	0.015368
9	0.016926
8	0.018837
7	0.021233
6	0.024325
5	0.028468
4	0.034306
3	0.043139
2	0.058039
1	0.088392
0	0.182322

$$(A)\begin{cases} S_n = \dfrac{1}{n} - 5S_{n-1}, & n = 0,1,2,\cdots,20 \\ S_0 = ln6 - ln5 = 0.182322 \end{cases}$$

2° 利用递推公式(A)计算其值，计算结果见表1。

3° 讨论积分

$$S_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5} dx$$

发现具有下列几个特性：

1） $S_n > 0$；

2） $S_n < S_{n-1}$；

3） 当$n \to \infty$时，$S_n \to 0$；

4） 因为

$$S_{n-2} > S_{n-1} > S_n$$

所以

$$5S_{n-1} < S_n + 5S_{n-1} < 6S_{n-1}$$

由于

$$S_n + 5S_{n-1} = \frac{1}{n}$$

所以

$$\frac{1}{6n} < S_{n-1} < \frac{1}{5n}$$

但实际上我们从表1发现，$S_{12} < 0$，往后的 S_i 值正负交替出现，其绝对值不是趋于零，而是不断增加，从而理论分析与实际计算的结果严重不符，所以按方案(A)计算是不可靠的。

现在采用新的方案(B)。由于

$$\frac{1}{6 \times 21} < S_{20} < \frac{1}{5 \times 21}$$

就粗略的取

$$S_{20} \doteq \frac{\dfrac{1}{6 \times 21} + \dfrac{1}{5 \times 21}}{2} = 0.008730$$

按下面递推关系计算

$$(B)\begin{cases}S_{n-1}=-\dfrac{S_n}{5}+\dfrac{1}{5n}, & n=20,19,\cdots,2,1\\ S_{20}\doteq 0.008730\end{cases}$$

计算结果见表 2。

由表 2 发现 S_0与$ln6-ln5$的计算结果一样，这说明在方案(A) 中计算的结果越往后就越不可靠；但方案（B）尽管粗略取$S_{20}\doteq 0.008730$，而按递推方案(B)计算却能基本反映出S_n的特性，最后求出的 S_0又很准确，所以说按方案(B)计算的结果是可靠的。

5　解

$$\int_N^{N+1}\frac{1}{1+x^2}dx=arctgx\Big|_N^{N+1}$$

$$=arctg(N+1)-arctgN$$

当N充分大时，应把上式变形为

$$arctg(N+1)-arctgN=arctg\frac{1}{1+N(N+1)}$$

然后再进行计算才可以。

6　解　应用求根公式有

$$x=\frac{-1\pm\sqrt{1+4\times1\times1150}}{2\times1}$$

$$=\frac{-1\pm\sqrt{4601}}{2}\doteq\frac{-1\pm67.83}{2}$$

得

$$x_1\doteq 33.415,\ x_2\doteq -34.415.$$

先讨论在$x_1=33.415$附近二次式的性态。

当 $x\doteq 33.4$时，$f(33.4)\doteq -1.04$

当 $x\doteq 33.5$时，$f(33.5)\doteq 5.75$

这就是说$x=33.4$与33.5仅差0.1，而后者的函数值却是前者的六倍，即$-6f(33.4)\doteq f(33.5)$，所以二次式在$x=33.415$附近

是病态的。其次讨论$x_2=-34.415$附近的性态：

当 $x\doteq-34.4$时，$f(-34.4)\doteq-1.01$

当 $x\doteq-34.5$时，$f(-34.5)\doteq5.75$

它说明 $x=-34.4$与$x=-34.5$仅差0.1，而后者的函数值却是前者的六倍，即$-6f(-34.4)\doteq f(-34.5)$，所以二次式在$x=-34.415$附近也是病态的。

7　**解**　已知$\Delta\lg a\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-n}$，$\lg e\approx0.43432\cdots$，由(4.1)知

$$df=\left|\frac{\lg e}{x}\right|_a dx=\lg e\varepsilon_a$$

即

$$\varepsilon_a=\frac{df}{\lg e}$$

所以$-10^{-n}<\varepsilon_a<\frac{1}{0.434}\times\frac{1}{2}\times10^{-n}\doteq\frac{1}{8}\times10^{-(n-1)}$

由于ε_a几乎与10^{-n}相等，可知a至少有n个可靠数字。

第二章　代数（或超越）方程的数值解法习题解答

习　　题　2·2

1　（1）解　先确定方程 $x^3-412=0$ 最小正根所在区间.

因为

$$f(7)=7^3-412=343-412<0$$

$$f(8)=8^3-412=512-412>0$$

故最小正根 $x^*\in[7,8]$.

其次用误差估计式求满足精度要求的 x_n 的最小 n 值.

由于要求根精确到 10^{-3}，也就是要求

$$|x_n-x^*|\leqslant\frac{1}{2^n}(b-a)\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-3}$$

由此解得：

$$n\geqslant\frac{\lg(8-7)+3}{\lg2}+1=11$$

即 x_{11} 可达到精度要求.

最后用区间二分法公式计算得

$$x^*\doteq x_{11}=7.441$$

（2）解　先确定最小正根所在区间. 因为

x	0	1	2	3
$f(x)$	-5	-6	-1	16

故最小正根 $x^*\in[2,3]$.

其次由误差估计式求精确到10^{-3}的 x_n 的最小 n 值，同题（1）得 $n=11$。

最后用区间二分法公式计算到 x_{11} 得：

$$x^* \doteq x_{11} = 2.095$$

2　解　由于$f(x)=x^3-3x+1$

$$f(0)=1>0,\ f(1)=-1<0,$$

所以最小正根$x^*\in[0,\ 1]$。

又由于

$$f'(x)=3x^2-3,\ f''(x)=6x$$

故有

$$m_1=\min_{0\le x\le 1}|f'(x)|=0$$

$$M_2=\max_{0\le x\le 1}|f''(x)|=6$$

显然在$[0,\ 1]$上不满足 $K=\dfrac{M_2}{2m_1}<1$。

利用区间二分法计算：

$$x_1=\frac{1}{2}(0+1)=0.5,\ f(0.5)=-0.375<0.$$

所以　$x^*\in[0,\ 0.5]$

而在区间$[0,\ 0.5]$上有

$$m_1=2.25,\ M_2=3$$

$$K=\frac{M_2}{2m_1}=\frac{3}{4.5}=\frac{2}{3}<1$$

所以取最小正根所在区间为$[0,\ 0.5]$满足要求。

3　解　设$f(a)<0,\ f(b)>0$。

如把区间$[a,b]$三等分，则有两个分点：

$$x_1=\frac{1}{3}(2a+b),\quad x_2=\frac{1}{3}(a+2b)$$

则必有下列情况之一成立：

（1）$f(x_1)=0$　或　$f(x_2)=0$，

则有　　$x^* = x_1$ 或 $x^* = x_2$.

　　（2）$f(x_1)>0$，$f(x_2)>0$，

则有　　$x^* \in [a_1, b_1] = [a, x_1]$.

　　（3）$f(x_1)<0$，$f(x_2)>0$，

则有　　$x^* \in [a_1, b_1] = [x_1, x_2]$.

　　（4）$f(x_1)<0$，$f(x_2)<0$，

则有　　$x^* \in [a_1, b_1] = [x_2, b]$.

故无论那种情况都有

$$x^* \in [a_1, b_1], \quad b_1 - a_1 = \frac{1}{3}(b-a).$$

　　由此看出每次需计算两个分点及其函数值，相当于两步区间二分法计算量，所以此法不如区间二分法优越。

习　题　2·3

　　1　（1）解　用单点弦法：

　　1° 确定最小正根所在区间。

因为

$$f(2) = -1 < 0, \quad f(3) = 16 > 0$$

故　　$x^* \in [2, 3]$.

　　2° 检验收敛条件：

因为　　$f'(x) = 3x^2 - 2 > 0$，$f''(x) = 6x > 0$

所以满足定理条件（2）.

　　3° 确定初值和迭代公式：

由于　　$f'(x)f''(x) > 0$

故取　　$x_0 = 2$，迭代公式：

$$x_{n+1} = x_n - \frac{3 - x_n}{16 - f(x_n)} f(x_n), \quad n = 0, 1, \cdots$$

　　4° 具体计算如下：

n	x_n	$f(x_n)$
0	2	−1
1	2.0588	−0.3911
2	2.0813	−0.1468
3	2.0897	−0.0540
4	2.0928	−0.0195
5	2.0940	−0.0062
6	2.0944	−0.0017
7	2.0945	−0.0006
8	2.0945	

所以　　$x^* \doteq 2.095$。

用双点弦法：

1°，2°与单点弦法同。

3°选取初值 x_0，x_1满足收敛条件：由

$$f(x_0)f''(x) > 0,\ f(x_1)f''(x) > 0$$

可选取　$x_0 = 3$，$x_1 = 2.5$。使用迭代公式：

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})} f(x_n),$$

$$n = 1, 2 \cdots$$

4°具体计算如下：

n	x_n	$f(x_n)$
1	2.5	5.625
2	2.229	1.617
3	2.120	0.288
4	2.096	0.016
5	2.095	0.005
6	2.095	

所以　　$x^* \doteq 2.095$。

（2）解　用单点弦法：

1° 确定最小正根所在区间：因为

$$f(0) = -2 < 0, \quad f\left(\frac{\pi}{4}\right) = \frac{3\pi}{4} - \frac{\sqrt{2}}{2} - 1 \doteq 0.65 > 0$$

故最小正根$x^* \in \left[0, \frac{\pi}{4}\right]$。

2° 检验收敛条件：因为

$$f'(x) = 3 + \sin x > 0, \quad f''(x) = \cos x > 0$$

所以满足定理条件（2）。

3° 确定初值和迭代公式：由于

$$f'(x) f''(x) > 0$$

故取　　$x_0 = 0$，迭代公式：

$$x_{n+1} = x_n - \frac{\frac{\pi}{4} - x_n}{f\left(\frac{\pi}{4}\right) - f(x_n)} f(x_n), \quad n = 0, 1, \cdots$$

4° 具体计算得：

$x^* \doteq x_4 = 0.607$

（3）解　用单点弦法，

1° 确定最小正根所在区间：因为

$f(4) = 4 - \operatorname{tg}4 \doteq 2.84 > 0$

$f(4.6) = 4.6 - \operatorname{tg}4.6 \doteq -4.26 < 0$

故最小正根 $x^* \in [4, 4.6]$。

2° 检验收敛条件：因为

$f'(x) = 1 - \sec^2 x = -\operatorname{tg}^2 x < 0$

$f''(x) = -2\operatorname{tg}x\sec^2 x < 0$

所以满足定理条件（2）。

3° 确定初值和迭代公式：由于

$f'(x)f''(x) > 0$

故取　$x_0 = 4$，迭代公式：

$$x_{n+1} = x_n - \frac{4.6 - x_n}{f(4.6) - f(x_n)} f(x_n), \quad n = 0, 1 \cdots$$

4° 具体计算得：

$x^* \doteq x_{11} = 4.493$

用双点弦法：

1°、2° 与单点弦法同。

3° 选取初值x_0，x_1 满足收敛条件：由

$f(x_0)f''(x) > 0$，$f(x_1)f''(x) > 0$

可选取　$x_0 = 4.6$，$x_1 = 4.5$。

4° 使用双点弦法迭代公式计算得：

$x^* \doteq x_5 = 4.493$

（4）解　用单点弦法。

1° 确定最小正根所在区间：因为

$f(0) = 1 > 0$，$f(1) = -2 < 0$

故最小正根 $x^* \in [0, 1]$。

2° 检验收敛条件：因为

$$f'(x)=2^x ln2-4<0$$

$$f''(x)=2^x ln^2 2>0$$

所以满足定理条件（2）.

3° 确定初值和迭代公式：由于

$$f'(x)f''(x)<0$$

故取 $x_0=1$，迭代公式：

$$x_{n+1}=x_n-\frac{x_n-0}{f(x_n)-1}f(x_n),\ n=0,1,\cdots$$

4° 具体计算得：

$$x^*\doteq x_4=0.310$$

用双点弦法。

1° 2° 与单点弦法同。

3° 检验定理3收敛条件（3）：因为

$$M_2=\max_{0\leqslant x\leqslant 1}|f''(x)|=2\ln^2 2\doteq 0.961$$

$$m_1=\min_{0\leqslant x\leqslant 1}|f'(x)|=|2\ln 2-4|\doteq 2.613$$

$$R=\max\{|x_1-x^*|,\ |x_0-x^*|\}\leqslant 1$$

所以

$$K\cdot R=\frac{M_2\cdot R}{2m_1}<1$$

满足收敛条件（3）.

我们取 $x_0=0$，$x_1=0.5$。

4° 具体计算得：

$$x^*\doteq x_4=0.310$$

（5）解 用单点弦法。

1° 确定最小正根所在区间：因为

$$f(1.2)=-1.5744<0,\ f(2)=8>0$$

故最小正根 $x^*\in[1.2,\ 2]$.

2° 检验收敛条件：因为

$$f'(x)=4x^3-3x^2-6x+12>0$$

$$f''(x)=12x^2-6x-6>0$$

所以满足定理条件（2）

3°．确定初值和迭代公式：由于

$$f'(x)f''(x)>0$$

故取　$x_0=1.2$，迭代公式：

$$x_{n+1}=x_n-\frac{2-x_n}{8-f(x_n)}f(x_n),\ n=0,1,\cdots$$

4°具体计算得：

$$x^*\doteq x_8=1.398$$

用双点弦法．

1° 2°与单点弦法同。

3°选取初值 x_0，x_1 满足收敛条件：由

$$f(x_0)f''(x)>0,\ f(x_1)f''(x)>0$$

可选取　$x_0=2$，$x_1=1.5$。

4°使用双点弦法迭代公式计算得：

$$x^*\doteq x_5=1.398$$

2　**证明**　因为计算$\sqrt{a}$ $(a>0)$等价于求

$$x^2-a=0$$

的正根。而用双点弦法求方程$x^2-a=0$正根的迭代公式为

$$x_{n+1}=x_n-\frac{x_n-x_{n-1}}{(x_n^2-a)-(x_{n-1}^2-a)}(x_n^2-a)$$

$$=x_n-\frac{x_n-x_{n-1}}{x_n^2-x_{n-1}^2}(x_n^2-a)$$

$$=x_n-\frac{(x_n^2-a)}{x_n+x_{n-1}}$$

$$=\frac{x_n\cdot x_{n-1}+a}{x_n+x_{n-1}},\ n=1,2,\cdots$$ 证完。

3　**证明**　由微分中值定理有：

$$f(x^*)-f(x_n)=f'(\xi)(x^*-x_n)$$

其中ξ在x_n和x^*中间。

所以

$$|f(x^*)-f(x_n)|=|f'(\xi)|\cdot|x^*-x_n|$$

$$|x^*-x_n|=\frac{|f(x^*)-f(x_n)|}{|f'(\xi)|}$$

又因为

$$f(x^*)=0,\quad \min|f'(x)|=m\neq 0$$

故有

$$|x^*-x_n|\leqslant\frac{|f(x_n)|}{m}$$ 证完。

4 证明 由已知$f'(x)>0$，$f''(x)<0$，$f(a)<0$，$f(b)>0$。我们取$x_0<x_1$，且$f(x_0)<0$，$f(x_1)<0$。则由

$$x_2=x_1-\frac{x_1-x_0}{f(x_1)-f(x_0)}f(x_1),\qquad f(x_1)>f(x_0)$$

得

$$x_2>x_1$$

又由于

$$x^*-x_2=-\frac{f''(\xi_1)}{f'(\eta_1)}(x^*-x_1)(x^*-x_0),\quad f(x^*)=0$$

得

$$x_0<x_1<x_2<x^*$$

完全同理可证明：

$$x_{n-1}<x_n<x_{n+1}<x^*$$

故得到$\{x_k\}$为单调增加序列，且有上界x^*。必存在极限，设为$\overline{x}$。再对于

$$x_{n+1}=x_n-\frac{x_n-x_{n-1}}{f(x_n)-f(x_{n-1})}f(x_n)$$

两边取极限得

$$\bar{x} = \bar{x} - \frac{f(\bar{x})}{f'(\bar{x})}$$

故有

$$f(\bar{x}) = 0$$

再由$[a, b]$上根的唯一性得

$$x_n \to \bar{x} = x^* \quad (n \to \infty)$$ 证完。

5　**证明**　设 $L_n(x)$为过x_{n-1}，x_n两点的弦，则由双点弦法收敛性定理证明得：

$$f(x) - L_n(x) = \frac{1}{2}f''(\xi_n)(x - x_n)(x - x_{n-1})$$

令　　$x = x_{n+1}$，则$L_n(x_{n+1}) = 0$，

$$f(x_{n+1}) = \frac{1}{2}f''(\xi_n)(x_{n+1} - x_n)(x_{n+1} - x_{n-1})$$

将左边减去 $f(x^*) = 0$，再用中值定理得：

$$f(x_{n+1}) - f(x^*) = f'(\xi_{n+1})(x_{n+1} - x^*)$$

$$= \frac{1}{2}f''(\xi_n)(x_{n+1} - x_n)(x_{n+1} - x_{n-1})$$

所以有

$$x_{n+1} - x^* = \frac{f''(\xi_n)}{2f'(\xi_{n+1})}(x_{n+1} - x_n)(x_{n+1} - x_{n-1})$$

$$|x^{n+1} - x^*| \leqslant \frac{M_2}{2m_1}|x_{n+1} - x_n| \cdot |x_{n+1} - x_{n-1}|$$ 证完。

6　**证明**　由条件（1），（2）易知方程：

$$f(x) = 0$$

在$[a, b]$内有唯一根 x^*。由平行弦程序：

$$x_{n+1} = x_n - f^{-1}(a, b)f(x_n), \quad n = 0, 1, \cdots$$

得误差方程为：

$$x^* - x_{n+1} = x^* - x_n + f^{-1}(a, b)f(x_n)$$

$$= x^* - x_n - f^{-1}(a, b)[f(x^*) - f(x_n)]$$

$$= [1 - f^{-1}(a, b)f'(\xi_n)](x^* - x_n)$$

其中ξ_n在x^*与x_n之间，由条件（3）得：

$$|x^*-x_{n+1}|\leqslant\rho|x^*-x_n|\leqslant\cdots$$
$$\leqslant\rho^{n+1}|x^*-x_0|$$

所以　$x_n\to x^*(n\to\infty)$　　证完。

习　题　2·4

1　（1）解　1° 确定最小正根所在区间：因为

$$f(2)=-1<0,\ f(3)=16>0$$

故　$x^*\in[2,3]$。

2° 检验收敛条件：因为

$$f'(x)=3x^2-2>0,\ f''(x)=6x>0$$

所以满足定理条件（2）。

3° 确定初值：由条件

$$f(x_0)f''(x)>0$$

故可取　$x_0=3$，使用切线法公式：

$$x_{n+1}=x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_n)},\ n=0,1,\cdots$$

4° 具体计算如下：

n	x_n	$f(x_n)$
0	3	16
1	2.36	3.4243
2	2.2568	1.9806
3	2.1077	0.1478
4	2.0947	0.0017
5	2.0945	0.0006
6	2.0945	

所以　　$x^* \doteq 2.0945$.

(2) 解　1° 确定最小正根所在区间：因为

$$f(0.1) = 0.701 > 0,\ f(0.5) = -0.375 < 0$$

故　　$x^* \in [0.1,\ 0.5]$.

2° 检验收敛条件：因为

$$f'(x) = 3x^2 - 3 < 0,\ f''(x) = 6x > 0$$

所以满足定理条件（2）.

3° 选取初值：由条件

$$f(x_0)f''(x) > 0$$

故可取　$x_0 = 0.1$.

4° 使用切线法迭代公式计算得：

$$x^* \doteq x_4 = 0.3473$$

(3) 解　1° 确定最小正根所在区间：因为

$$f(4) = 4 - tg4 \doteq 2.8422 > 0$$

$$f(4.5) = 4.5 - tg(4.5) \doteq -0.1373 < 0$$

故　　$x^* \in [4, 4.5]$

2° 检验收敛条件：因为

$$f'(x) = -tg^2 x < 0$$

$$f''(x) = -2tgx\sec^2 x < 0$$

所以满足定理条件（2）.

3° 选取初值：由条件　$f(x_0)f''(x) > 0$，可取　$x_0 = 4.5$.

4° 使用切线法迭代公式计算得：

$$x^* \doteq x_3 = 4.4934$$

(4) 解　1° 确定最小正根所在区间：因为

$$f(0) = 1 > 0,\quad f(1) = -2 < 0$$

故　　$x^* \in [0, 1]$

2° 检验收敛条件：因为

$$f(x) = 2^x ln2 - 4 < 0$$

$$f''(x) = 2^x ln^2 2 > 0$$

所以满足定理条件（2）.

3° 选取初值：由条件 $f(x_0)f''(x)>0$， 故可取 $x_0=0$.

4° 使用切线法迭代公式计算得：

$x^*\doteq x_3=0.3099$

（5）解　1° 确定最小正根所在区间：因为

$f(0.5)=-2.4375<0$，$f(0.6)\doteq 1.6896>0$

故　　$x^*\in[0.5, 0.6]$

2° 检验收敛条件：因为

$f'(x)=4x^3-120x^2+140x>0$

$f''(x)=12x^2-240x+140>0$

所以满足定理条件（2）.

3° 选取初值：由条件 $f(x_0)f''(x)>0$，可选取 $x_0=0.6$.

4° 使用切线法迭代公式计算得：

$x^*\doteq x_2=0.5594$

2　解　因计算$\frac{1}{N}$等价于求方程：

$$N-\frac{1}{x}=0$$

的根．而

$$f(x)=N-\frac{1}{x},\quad f'(x)=\frac{1}{x^2}$$

所以计算$\frac{1}{N}$的牛顿程序为：

$$x_{n+1}=x_n-\frac{N-\frac{1}{x_n}}{\frac{1}{x_n^2}}=2x_n-Nx_n^2$$

$$=(2-Nx_n)x_n$$

因计算$\sqrt{N}$等价于求方程：

$x^2-N=0$

的根。而

$$f(x)=x^2-N,\ f'(x)=2x$$

所以计算$\sqrt{N}$的牛顿程序为：

$$x_{n+1}=x_n-\frac{x_n^2-N}{2x_n}=\frac{1}{2}\left(x_n+\frac{N}{x_n}\right)\quad ,n=0,1,\cdots$$

下面证明：

$$\sqrt{N}\doteq\frac{A+B}{4}+\frac{N}{A+B}\qquad (N=A\cdot B)$$

由于

$$x_{n+1}=\frac{1}{2}\left(x_n+\frac{N}{x_n}\right),\qquad N=A\cdot B$$

可得

$$x_{n+1}=\frac{1}{2}\left[\frac{1}{2}\left(x_{n-1}+\frac{N}{x_{n-1}}\right)+\frac{N}{\frac{1}{2}\left(x_{n-1}+\frac{N}{x_{n-1}}\right)}\right]$$

$$=\frac{1}{4}\left[x_{n-1}+\frac{A\cdot B}{x_{n-1}}\right]+\left[\frac{A\cdot B}{x_{n-1}+\frac{A\cdot B}{x_{n-1}}}\right]$$

取$x_0=A\geqslant B$，则得：

$$\sqrt{N}\doteq x_2=\frac{A+B}{4}+\frac{N}{A+B}\quad 证完。$$

3　解　由于要求程序中不含开方，又无除法运算，故将计算$\frac{1}{\sqrt{a}}(a>0)$等价化为求

$$a-\frac{1}{x^2}=0$$

的正根。而此时有

$$f(x)=a-\frac{1}{x^2},\ f'(x)=\frac{1}{x^3}$$

所以计算$\frac{1}{\sqrt{a}}$的牛顿程序为：

$$x_{n+1}=x_n-\frac{a-\frac{1}{x_n^3}}{\frac{1}{x_n^3}}=2x_n-ax_n^3$$

$$=(2-ax_n^2)x_n$$

4　证明　由 $f'(x)<0$，$f''(x)<0$，再由定理条件（3）知：$f(x_0)<0$。

下面证明 $x_n\to x^*$，($n\to\infty$)，为此证明$\{x_n\}$单调有界．不妨设$f(x_n)<0$。

将 $f(x)$在 x_n处展成泰勒级数：

$$f(x)=f(x_n)+f'(x_n)(x-x_n)+\frac{1}{2}f''(\xi_n)(x-x_n)^2$$

其中ξ_n在x和x_n之间．令　$x=x^*$　得：

$$f(x^*)=f(x_n)+f'(x_n)(x^*-x_n)+\frac{1}{2}f''(\xi_n)(x^*-x_n)^2=0$$

故有

$$f'(x_n)(x^*-x_n)+f(x_n)=-\frac{1}{2}f''(\xi_n)(x^*-x_n)^2$$

以$f'(x_n)$除等式两边，得

$$x^*-\left[x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}\right]=-\frac{1}{2}\frac{f''(\xi_n)}{f'(x_n)}(x^*-x_n)^2$$

即

$$x^*-x_{n+1}=-\frac{1}{2}\frac{f''(\xi_n)}{f'(x_n)}(x^*-x_n)^2<0$$

故有　$x^*<x_{n+1}$

又由于

$$x_{n+1}=x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}<x_n$$

从而有

$$x^*<x_{n+1}<x_n,\quad n=0,1,\cdots$$

所以得$\{x_n\}$为单调下降序列，且有下界x^*. 此序列必有极限，设为$\bar{x}$. 对

$$x_{n+1}=x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

两边取极限得：

$$\bar{x}=\bar{x}-\frac{f(\bar{x})}{f'(\bar{x})}$$

故有 $f(\bar{x})=0$

再由$f(x)=0$在$[a,b]$内有唯一根x^*，所以

$$x_n\to x^*=\bar{x}\quad(n\to\infty)$$

5 **证明** 由切线法公式

$$x_n=x_{n-1}-\frac{f(x_{n-1})}{f'(x_{n-1})},\ n=1,2,\cdots$$

可得

$$f'(x_{n-1})(x_n-x_{n-1})+f(x_{n-1})=0$$

再将 $f(x)$在$x=x_{n-1}$点展成泰勒级数：

$$f(x)=f(x_{n-1})+f'(x_{n-1})(x-x_{n-1})+\frac{1}{2}f''(\xi)(x-x_{n-1})^2$$

其中ξ在x_n和x之间. 令 $x=x_n$，则有

$$f(x_n)=f(x_{n-1})+f'(x_{n-1})(x_n-x_{n-1})+\frac{1}{2}f''(\xi)(x_n-x_{n-1})^2$$

$$=\frac{1}{2}f''(\xi)(x_n-x_{n-1})^2$$

将左端减去$f(x^*)=0$，再由中值定理得：

$$f'(\eta)(x_n-x^*)=\frac{1}{2}f''(\xi)(x_n-x_{n-1})^2$$

其中η在x_n和x^*之间，ξ在x_{n-1}，x_n之间. 两边同除$f'(\eta)$得：

$$(x_n-x^*)=\frac{f''(\xi)}{2f'(\eta)}(x_n-x_{n-1})^2$$

$$\doteq \frac{f''(x_n)}{2f''(x_n)}(x_n - x_{n-1})^2$$

故有

$$|x_n - x^*| \doteq \left|\frac{f''(x_n)}{2f'(x_n)}\right| \cdot |x_n - x_{n-1}|^2$$

$$\leqslant \frac{M_2}{2m_1} |x_n - x_{n-1}|^2$$

6 （1）解 将 $Q(y)$在 $y=y_n$点展成泰勒级数到一次项，有

$$Q(y)=Q(y_n)+Q'(y_n)(y-y_n)+\frac{1}{2}Q''(\xi)(y-y_n)^2$$

令$y=0$时，有

$$Q(0)=Q(y_n)+Q'(y_n)(-y_n)+\frac{1}{2}Q''(\xi)(-y_n)^2$$

又由

$$x^*=Q(0),\ Q(y_n)=x_n,\ y_n=f(x_n)$$

$$Q'(y_n)=\frac{1}{f'(x_n)}$$

得

$$x^*=x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}+\frac{1}{2}f''(\xi)f^2(x_n)$$

$$\doteq x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

故可取 $x_{n+1}=x_n-\dfrac{f(x_n)}{f'(x_n)},\ n=0,1,\cdots$

（2）解 将 $Q(y)$在$y=y_n$点展成泰勒级数到二次项，有

$$Q(y)=Q(y_n)+Q'(y_n)(-y_n)+\frac{1}{2}Q''(y_n)(-y_n)^2+\frac{1}{3!}Q'''(\xi)(-y_n)^3$$

又由于

$$x^* = Q(0),\quad x_n = Q(y_n),\quad y_n = f(x_n)$$

$$Q'(y_n) = \frac{1}{f'(x_n)},\quad Q''(y_n) = -\frac{f''(x_n)}{[f'(x_n)]^3}$$

得：

$$x^* \doteq x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} - \frac{f''(x_n)}{2[f'(x_n)]^3} f^2(x_n)$$

故可取

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} - \frac{f''(x_n) f^2(x_n)}{2[f'(x_n)]^2},\quad n = 0, 1, \cdots$$

7　**解**　由　$x_{k+1} - x_k \doteq a(x_k - x_{k-1})^2$

可得

$$a \doteq \frac{x_{k+1} - x_k}{(x_k - x_{k-1})^2} = \frac{\Delta x_k}{(\Delta x_{k-1})^2}$$

再由

$$x_{k+2} - x_{k+1} \doteq a(x_{k+1} - x_k)^2$$

$$\doteq \frac{(\Delta x_k)^3}{(\Delta x_{k-1})^2}$$

取　$$\bar{x}_{k+1} = x_{k+2} \doteq x_{k+1} + \frac{(\Delta x_k)^3}{(\Delta x_{k-1})^2}$$

可得　$\bar{x}_{k+1}$比x_{k+1}更接近于x^*。

8　**证明**　不失一般性，不妨设：$f(a)<0$，$f(b)>0$，$f'(x)>0$，$f''(x)>0$。当取初值x_0，使$f(x_0)>0$时，则满足收敛定理条件（3）：$f(x_0)f''(x)>0$，所以牛顿法收敛。当取初值x_0，使得$f(x_0)<0$时，则由于

$$|f'(c)| \geqslant \frac{|f(c)|}{b-a}$$

可得：　$f'(a)(b-a) \geqslant |f(a)|$

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \leqslant x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(a)}$$

$$=x_0-\frac{f(a)+f'(\xi)(x_0-a)}{f'(a)}$$

其中ξ在a和x_0之间．所以有

$$f'(a)<f'(\xi)$$

$$x_1\leqslant a-\frac{f(a)}{f'(a)}\leqslant b$$

且

$$x_1=x_0-\frac{f(x_0)}{f'(x_0)}=x_0-\frac{f'(\eta)(x_0-x^*)}{f'(x_0)}$$

$$\geqslant x_0+(x^*-x_0)=x^*$$

所以得

$$x_1\in[x^*,b]$$

将x_1看作新的初值，则有$f(x_1)f''(x)>0$，所以牛顿法收敛．证完．

9 解 设$y=f(x)$在$(x_n,f(x_n))$点的密切双曲线为

$$F(x)=\frac{x+a}{\beta x+r}$$

则由密切性有：

$$f(x_n)=F(x_n),f'(x_n)=F'(x_n),f''(x_n)=F''(x_n)$$

也就是：

$$\begin{cases}\dfrac{x_n+a}{\beta x_n+r}=f(x_n) & (1)\\[2ex] \dfrac{r-\alpha\beta}{(\beta x_n+r)^2}=f'(x_n) & (2)\\[2ex] \dfrac{-2\beta(r-\alpha\beta)}{(\beta x_n+r)^3}=f''(x_n) & (3)\end{cases}$$

解此方程组，由（2），（3）得

$$\beta x_n+r=-\frac{2\beta f'(x_n)}{f''(x_n)} \qquad (4)$$

由（1），（4）得

$$x_n+\alpha=-\frac{2\beta f'(x_n)f(x_n)}{f''(x_n)} \tag{5}$$

又由（4）得

$$r=-\beta\left[\frac{2f'(x_n)}{f''(x_n)}+x_n\right] \tag{6}$$

再由（2），（4），（6）得

$$\frac{2f'(x_n)}{f''(x_n)}+(x_n+\alpha)=\frac{-4\beta[f'(x_n)]^3}{[f''(x_n)]^2}$$

$$x_n+\alpha=-\frac{2f'(x_n)f''(x_n)+4\beta[f'(x_n)]^3}{[f''(x_n)]^2} \tag{7}$$

再由（5），（7）得：

$$\beta=\frac{f''(x_n)}{f(x_n)f''(x_n)-2[f'(x_n)]^2} \tag{8}$$

将β代入（5）得：

$$x_n+\alpha=\frac{2f'(x_n)f(x_n)}{2[f'(x_n)]^2-f(x_n)f''(x_n)}$$

又因为 $F(\bar{x})=0$等价于 $\bar{x}+\alpha=0$，即

$$\bar{x}=-\alpha$$

$$=x_n-\frac{2f'(x_n)f(x_n)}{2[f'(x_n)]^2-f(x_n)f''(x_n)}$$

而 $\bar{x}\doteq x^*$

所以可取

$$x_{n+1}=x_n-\frac{2f'(x_n)f(x_n)}{2[f'(x_n)]^2-f(x_n)f''(x_n)}$$

$(n=0,1,\cdots)$作为求 $f(x)=0$根的迭代程序。

习　题 2·5

1　（1）解　1° 确定最小正根所在区间：因为

$$f(2) = -1 < 0, \quad f(3) = 16 > 0$$

故 $x^* \in [2, 3]$

2° 将方程同解变形使之满足收敛条件：将原方程

$$x^3 - 2x - 5 = 0$$

变形为

$$x = \frac{2x+5}{x^2} = \varphi_1(x)$$

则

$$\varphi'(x) = \frac{-2(x+5)}{x^3}$$

不满足条件：

$$\max_{2 \leqslant x \leqslant 3} |\varphi'(x)| < 1$$

再变形为

$$x = (2x+5)^{\frac{1}{3}} = \varphi(x)$$

则

$$\varphi'(x) = \frac{2}{3}(2x+5)^{-\frac{2}{3}}$$

$$\max|\varphi'(x)| \doteq 0.94 < 1$$

所以程序

$$x_{n+1} = (2x_n + 5)^{\frac{1}{3}}, \quad n = 0, 1, \cdots$$

收敛。

3° 选取初值 $x_0 = 2.5$，具体计算如下：

n	x_n
0	2.5
1	2.1544
2	2.1036

n	x_n
3	2.0959
4	2.0948
5	2.0946
6	2.0946

所以

$$x^* \doteq 2.095$$

（2）解 1° 确定最小正根所在区间：因为

$$f(1) = -9 < 0,\ f(2) = 22 > 0$$

故 $x^* \in [1, 2]$。

2° 将原方程变形使之满足收敛条件；

将原方程 $x^5 - 10 = 0$ 变形为

$$x = x - \frac{1}{50}(x^5 - 10) = \varphi(x)$$

则满足条件

$$\max_{1 \leq x \leq 2} |\varphi'(x)| = 0.9 < 1$$

所以程序

$$x_{n+1} = x_n - \frac{1}{50}(x_n^5 - 10),\ n = 0, 1, \cdots$$

收敛。

3° 选初值 $x_0 = 1.5$，计算得：

$$x^* \doteq x_9 = 1.585$$

（3）解 1° 确定最小正根所在区间：因为

$$f(4) = 2.8422 > 0,\ f(4.5) = -1.373 < 0$$

故 $x^* \in [4, 4.5]$。

2° 将方程变形使之满足收敛条件：将原方程

$$x - \operatorname{tg} x = 0$$

变形为 $x = arctgx = \varphi(x)$

则 $\varphi'(x) = \frac{1}{1+x^2}$ 在〔4, 4.5〕上恒小于 1。

所以程序：

$$x_{n+1} = arctgx_n, \quad n = 0, 1, \cdots$$

收敛。

3° 选初值 $x_0 = 4.25$，计算得：

$$x^* \doteq x_4 = 4.4934$$

（4）解 1° 确定最小正根所在区间：因为

$$f(0) = 1 > 0, f(1) = -2 < 0$$

故 $x^* \in [0, 1]$。

2° 将方程同解变形满足收敛条件：将原方程

$$2^x - 4x = 0$$

变形为 $x = \frac{1}{4}2^x = \varphi(x)$

则 $\varphi'(x) = \frac{1}{4}ln2 \cdot 2^x$ 在〔0, 1〕上恒小于1，所以程序：

$$x_{n+1} = \frac{1}{4} \cdot 2x_n, \quad n = 0, 1, \cdots$$

收敛。

3° 选初值 $x_0 = 0.5$，计算得：

$$x^* \doteq x_7 = 0.310$$

2 解 迭代程序

$$x_{n+1} = x_n - af(x_n), \quad n = 0, 1, \cdots$$

对应于方程变形

$$x = x - af(x) = \varphi(x)$$

则 $\varphi'(x) = 1 - af'(x)$

由一般迭代法收敛条件得：

$$|\varphi(x)| = |1 - af'(x)| < 1, \quad x \in [a, b]$$

时该迭代程序收敛.

解不等式得：
$$-1<1-\alpha f'(x)<1$$
$$0<\alpha f'(x)<2$$

若设 $f'(x)$在$[a,b]$上连续，且不变号，$M_1=\max\limits_{a\le x\le b}|f'(x)|$，则当 α 与 $f'(x)$同号，且满足：

$$0<|\alpha|<\frac{2}{M_1}\text{时，} x_n\to x^* \quad (n\to\infty)$$

3 解 简化牛顿程序

$$x_{n+1}=x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_0)},\ n=0,1,\cdots$$

作为一般迭代法程序对应于方程变形为

$$x=x-\frac{f(x)}{f'(x_0)}=\varphi(x)$$

则
$$\varphi'(x)=1-\frac{f'(x)}{f'(x_0)}$$

由一般迭代法收敛条件得：

$$|\varphi'(x)|=\left|1-\frac{f'(x)}{f'(x_0)}\right|<1,\ x\in[a,b]$$

该程序收敛.

解不等式得：

$$-1<1-\frac{f'(x)}{f'(x_0)}<1$$

$$0<\frac{f'(x)}{f'(x_0)}<2$$

当 $f'(x_0)>0$ 时，$0<f'(x)<2f'(x_0)$，当 $f'(x_0)<0$ 时，$2f'(x_0)<f'(x)<0$。即当$f'(x)$在$[a,b]$上连续且不变号，又有$|f'(x)|<2|f'(x_0)|$时，简化牛顿程序收敛.

下面证明：

$$|x_{n+1}-x^*|\leqslant\frac{|f'(x_0)|}{m}|x_{n+1}-x_n|$$

由 $$x_{n+1}=x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_0)}=\varphi(x_n),\quad x^*=\varphi(x^*)$$

可得

$$x_{n+1}-x^*=\varphi'(\xi_n)(x_n-x^*)$$
$$=\varphi'(\xi_n)(x_n-x_{n+1}+x_{n+1}-x^*)$$

其中ξ_n在x_n和x^*之间。故有

$$(x_{n+1}-x^*)[1-\varphi'(\xi_n)]=\varphi'(\xi_n)(x_n-x_{n+1})$$

$$(x_{n+1}-x^*)=\frac{\varphi'(\xi_n)}{1-\varphi'(\xi_n)}(x_n-x_{n+1})$$

$$=\frac{1-\frac{f'(\xi_n)}{f'(x_0)}}{f'(\xi_n)/f'(x_0)}(x_n-x_{n+1})$$

$$=\frac{f'(x_0)-f'(\xi_n)}{f'(\xi_n)}(x_n-x_{n+1})$$

又由 $0<|f'(x)|<2|f'(x_0)|$，故有$0<|f'(\xi_n)|<2|f'(x_0)|$，所以有

$$|x_{n+1}-x^*|=\left|\frac{f'(x_0)-f'(\xi_n)}{f'(\xi_n)}\right|\cdot|x_n-x_{n+1}|$$

$$\leqslant\frac{|f'(x_0)|}{m_1}\ |x_n-x_{n+1}|$$

4 解 因

$$x=x-\frac{f(x)}{f'(x)}=\varphi(x)$$

则有

$$\varphi'(x)=1-\frac{[f'(x)]^2-f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2}$$

$$=\frac{f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2}$$

所以有收敛条件为：

$$\max_{a \leqslant x \leqslant b} \left| \frac{f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2} \right| < 1$$

5 证明 对一般迭代法程序有：

$$x_{n+1} = \varphi(x_n), \quad x^* = \varphi(x^*)$$

故有

$$x_{n+1} - x^* = \varphi(x_n) - \varphi(x^*)$$

$$= \varphi'(x^*)(x_n - x^*) + \frac{\varphi''(\xi_n)}{2}(x_n - x^*)^2$$

其中 ξ_n在 x_n和 x^*之间。当 $\varphi'(x^*) \neq 0$时，则有

$$\frac{|x_{n+1} - x^*|}{|x_n - x^*|} = \varphi'(x^*) + \frac{\varphi''(\xi_n)}{2}(x_n - x^*)$$

$$\to \varphi'(x^*) \quad (n \to \infty)$$

所以方法为线性收敛。当 $\varphi'(x^*) = 0$时，则有

$$\frac{|x_{n+1} - x^*|}{|x_n - x^*|^2} = \frac{\varphi''(\xi_n)}{2} \to \frac{\varphi''(x^*)}{2}$$

所以方程为平方收敛。

而把牛顿法作为一般迭代法则有：

$$\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

$$\varphi'(x) = \frac{f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2}$$

当 $f'(x^*) \neq 0$时，则有

$$\varphi'(x^*) = \frac{f(x^*)f''(x^*)}{[f'(x^*)]^2} = 0$$

所以这时有牛顿法为平方收敛。再将$\varphi(x)$在x^*点展开：

$$\varphi(x) = \varphi(x^* + h) = (x^* + h) - \frac{f(x^* + h)}{f'(x^* + h)}$$

$$= (x^* + h) - \frac{f(x^*) + f'(x^*)h + f''(x^*)\dfrac{h^2}{2} + O(h^3)}{f'(x^*) + f''(x^*)h + O(h^2)}$$

当 $f'(x^*)=0$时，则有

$$\varphi(x^*+h)=(x^*+h)-\frac{f''(x^*)\frac{h^2}{2}+O(h^3)}{f''(x^*)h+O(h^2)}$$

$$=x^*+\frac{h}{2}+O(h^2)$$

因此有

$$\varphi'(x^*)=\lim_{h\to 0}\frac{\varphi(x^*+h)-\varphi(x^*)}{h}=\frac{1}{2}$$

所以这时牛顿法为线性收敛。

但这时将程序修改为：

$$x_{n+1}=x_n-2\frac{f(x_n)}{f'(x_n)},\quad n=0,1,\cdots$$

则 $$\varphi(x)=x-2\frac{f(x)}{f'(x)}$$

$$\varphi(x^*+h)=(x^*+h)-h+O(h^2)$$

$$\varphi'(x^*)=0$$

所以修正程序为平方收敛。

6 解 设每年应增长百分数为x，依题意则有

$$1+(1+x)+(1+x)^2+(1+x)^3+(1+x)^4=7$$

令 $y=1+x$，则得：

$$y^4+y^3+y^2+y-6=0$$

用一般迭代法求此方程的根。因为

$$f(1)=-2<0,\quad f(1.5)=6.1875>0$$

所以 $y^*\in[1,1.5]$

取初值为 $y_0=1.25$，使用迭代公式：

$$y_{n+1}=y_n-\frac{1}{20}(y_n^4+y_n^3+y_n^2+y_n-6)\quad(n=0,1,\cdots)$$

求得：

$$y^*\doteq 1.169$$

所以　　$x \doteq 0.169$

答：每年应增长率为16.9%。

习　　题　2·6

1　（1）解　我们取尾部二次式，即

$x^2+1.0417x-0.625$

作为初始近似二次因式，按劈因子法迭代过程列表计算如下：

k	P_k	q_k	（上行）$b_i^{(k)}(0\leqslant i\leqslant n)$ （下行）$c_j^{(k)}(0\leqslant j\leqslant n-1)$	ΔP_k	Δq_k	δ_k
0	1.0417	−0.625	1,5.9583,18.4182,9.5377,−13.424 1,4.9166,13.9216,−1.8916	0.7951	−0.3115	250.0042
1	1.8368	−0.9365	1,5.1632,15.4527,1.4518,−3.1952 1,3.3264.10.279,−14.3135	0.1616	−0.0630	158.0995
2	1.9984	−0.9995	1,5.0016,15.0043,0.0145,−0.0322 1,3.0032,10.0022,−16.9722	0.0011	−0.0005	151.0585
3	1.9995	−1.0000	1,5.0005,15.0015,0.0050,−0.0085 1,3.0010,10.0010,−16.9910	0.0005	0.0000	151.0250
4	2.0000	−1.0000	1,5.0000,15.0000,0.0000,0.0000 1,3.0000,10.0000,−17.0000	0.0000	0.0000	

因此得多项式：

$$x^4+7x^3+24x^2+25x-15$$

的一个二次因式为：

$$\varphi(x)=x^2+2x-1$$

（2）解　我们取尾部二次式，即

$$x^2-1.1273x-2.0877$$

作为初始二次因式，按劈因子法迭代过程列表计算如下：

k	p_k	q_k	（上行）$b_i^{(k)}(0\leqslant i\leqslant n)$ / （下行）$c_j^{(k)}(0\leqslant j\leqslant n-1)$	ΔP_k	Δq_k	δ_k
0	-1.1273	-2.0877	1,40.1273,1005.3232,137.0746,253.3374 141.2546,1053.9172,1411.2827	0.1266	0.0873	1058174.52
1	-1.0007	-2.0004	1,40.0007,1000.0291,0.7465,1.2052 1,41.0014,1043.0596,1126.5554	0.0007	0.0004	1041813.59
2	-1.0000	-2.0000	1,40,1000,0,0 1,41,1043,1125	0	0	

因此得多项式：

$$x^4+39x^3+958x^2-1080x-2000$$

的一个二次因式为：

$$\varphi(x)=x^2-x-2$$

2

解　设多项式

$$f(x)=a_0+a_1x+\cdots+a_nx^n$$

的一个精确一次因式为：

$$x - r^*$$

初始近似一次因式为：

$$x - r_0$$

则有

$$f(x) = (x - r)Q(x) + R \quad (1)$$

而　R 为 r 的函数，记作$R = R(r)$，若令

$$r^* = r_0 + \Delta r_0$$

则由泰劳公式得：

$$R(r^*) \doteq R(r_0) + R'(r_0)\Delta r_0 \doteq 0$$

为求Δr_0，须先求$R(r_0)$，$R'(r_0)$，显然有

$$R(r_0) = f(r_0)$$

我们将（1）式对 r 求导得：

$$0 = -Q(x) + (x - r)\frac{dQ}{dr} + \frac{dR}{dr}$$

$$Q(x) = (x - r)\frac{dQ}{dr} + \frac{dR}{dr}$$

从而可得：

$R'(r_0)$为用$(x - r_0)$除 $Q(x)$所得余项，即

$$R'(r_0) = Q(r_0)$$

于是得到：$\Delta r_0 \doteq -\dfrac{R(r_0)}{R'(r_0)}$

若我们取

$$r_1 = r_0 - \frac{R(r_0)}{R'(r_0)}$$

则定有 r_1 比 r_0 更接近于精确值 r^*。重复此过程可得到计算公式：

$$r_{n+1} = r_n - \frac{R(r_n)}{R'(r_n)}, \quad n = 0, 1, \cdots$$

这显然就是求方程：

$$R(r)=0$$

的根，初值取为 r_0 的牛顿法程序．当在

$$R'(r^*)=0$$

时，具有平方敛速。

第三章 线性代数计算法习题解答

习 题 3·2

1 （1）**解** 因为$|A_1| = 2$，$|A_2| = -1$，$|A_3| = 1$，各阶主子式不等于零，于是可用简单消元法计算，其具体计算如下表

	$Ⅰ_i$	x_1	x_2	x_3	常数项	说 明
Ⅰ	$Ⅰ_1$	2	3	5	5	$l_{21} = \frac{a_{21}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}} = \frac{3}{2}$
	$Ⅰ_2$	3	4	7	6	
	$Ⅰ_3$	1	3	3	5	$l_{31} = \frac{a_{31}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}} = \frac{1}{2}$
Ⅱ	$Ⅱ_1$	2	3	5	5	$Ⅰ_1 = Ⅱ_1$ $Ⅰ_2 - l_{21} \times Ⅰ_1 = Ⅱ_2$
	$Ⅱ_2$	0	0.5	0.5	1.5	$Ⅰ_3 - l_{31} \times Ⅰ_3 = Ⅱ_3$
	$Ⅱ_3$	0	1.5	0.5	2.5	$l_{32} = \frac{1.5}{0.5}$
Ⅲ	$Ⅲ_1$	2	3	5	5	
	$Ⅲ_2$	0	0.5	0.5	1.5	
	$Ⅲ_3$	0	0	−1	−2	$Ⅱ_3 - l_{32} \times Ⅱ_2 = Ⅲ_3$

由回代过程解得：

$x_3 = 2$

$x_2 = (1.5 - 0.5 \times 2)/0.5 = 1$

$x_1=(5-3\times1-5\times2)/2=-4$

$x^*=(-4,\ 1,\ 2)^T$

（2）解　因为各阶主子式

$|A_1|=2,\ |A_2|=4,\ |A_3|=-32,\ |A_4|=-240$

都不为零，于是可应用简单消元法计算，其解为：

$x^*\doteq(-3.5,\ -1.53,\ 0.35,\ -0.65)^T$

此方程组的精确为

$x^*=(-3.3,\ -1.6,\ 0.4,\ -0.6)^T$

其次再用主元消元法解方程组（1），（2），

（1）　解　因为 $|A|=1$，此方程组有唯一解．按列主元消元法解，列表计算如下：

	I_i	x_1	x_2	x_3	常数项	说　　明
Ⅰ	I_1	2	3	5	5	列主元为3，I_2为主方程
	I_2	[3]	4	7	6	I_1与I_2交换行
	I_3	1	3	3	5	$l_{21}=2/3, l_{23}=1/3$
Ⅱ	I_1	3	4	7	6	$\mathrm{I}_2=\mathrm{II}_1$
	I_2	0	0.3333	0.3333	1	$\mathrm{I}_1-\mathrm{I}_2\times l_{21}=\mathrm{II}_2$ $\mathrm{I}_3-\mathrm{I}_2\times l_{23}=\mathrm{II}_3$
	I_3	0	[1.6667]	0.6667	3	$l_{32}=0.3333/1.6667$
Ⅲ	II_1	3	4	7	6	$\mathrm{II}_1=\mathrm{III}_1$
	II_2	0	1.6667	0.6667	3	$\mathrm{II}_2=\mathrm{III}_2$
	II_3	0	0	0.2	0.4	$\mathrm{II}_2-\mathrm{II}_3\times l_{32}=\mathrm{III}_3$
Ⅳ	IV_1	1	0	0	-4	$\mathrm{III}_3/0.2=\mathrm{IV}_3$
	IV_2	0	1	0	1	$(\mathrm{III}_2-0.6667\times\mathrm{IV}_3)\div$ $\div1.6667=\mathrm{IV}_2$
	IV_3	0	0	1	2	$(\mathrm{III}_1-4\mathrm{IV}_3-7\mathrm{IV}_3)/3=\mathrm{IV}_1$

此方程组的解

$$x^* = (-4,\ 1,\ 2)^T$$

（2）用列主元消元法解，可按（1）题的格式计算，其解为：

$$x^* = (-3.3,\ -1.6,\ 0.4,\ -0.6)^T$$

按全主元消元法解，列表计算如下：

	Ⅰ₁	x_1	x_2	x_3	常数项	说　明
Ⅰ	Ⅰ₁	5	3	5	5	主元为 7，Ⅰ₂为主方程
	Ⅰ₂	3	4	7	6	$l_{21}=5/7$
	Ⅰ₃	1	3	3	5	$l_{23}=3/7$
Ⅱ	Ⅱ₁	−0.1429	0.1429	0	0.7143	Ⅰ₁ − l_{21} × Ⅰ₂ = Ⅱ₁
	Ⅱ₂	3	4	7	6	主元为1.2857，Ⅱ₃为主方程
	Ⅱ₃	−0.2857	1.2857	0	2.4286	Ⅰ₃ − l_{23} × Ⅰ₂ = Ⅱ₃
Ⅲ	Ⅲ₁	−0.1111	0	0	0.4444	Ⅱ₁ − Ⅱ₃ × l_{12} = Ⅲ₁
	Ⅲ₂	3	4	7	6	Ⅱ₂ = Ⅲ₂
	Ⅲ₃	−0.2857	1.2857	0	2.4286	Ⅱ₃ = Ⅲ₃
Ⅳ	Ⅳ₁	1	0	0	−4	Ⅲ₁/−0.1111 = Ⅳ₁
	Ⅳ₂	0	0	1	1	(Ⅲ₂ − 3 × Ⅳ₁ − 4Ⅳ₃)/7 = Ⅳ₂
	Ⅳ₃	0	1	0	2	(Ⅲ₃ + 0.2857 × Ⅳ₁) ÷ 1.2857 = Ⅳ₃

所以解为

$$x^* = (-4,\ 1,\ 2)^T$$

注意主元消元法，当主元选定，主方程亦定，此时可以交换行的位置，也可以不交换行的位置而直接计算。

（2）题的主元消元法的计算，请读者按（1）题的格式自己完成，其答案为

$$x^* = (-3.3,\ -1.6,\ 0.4,\ -0.6)^T.$$

2 解 由于题设

$$a_{ij}=a_{ji},\quad 1\leqslant i,\ j\leqslant n$$

且当

$$x\neq 0 \text{ 时，} (Ax,x)=x^T Ax>0$$

首先证 $a_{ii}>0,\quad i=1,2,\cdots,n$。取

$$x=(0,\cdots,0,\overset{i}{1},0,\cdots,0)^T$$

则

$$Ax=\begin{pmatrix} a_{11}\cdots a_{1n} \\ \cdots\cdots\cdots \\ a_{i1}\cdots a_{in} \\ \cdots\cdots\cdots \\ a_{n1}\cdots a_{nn}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\ \vdots\\ 1\\ \vdots\\ 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a_{1i}\\ \vdots\\ a_{ii}\\ \vdots\\ a_{ni}\end{pmatrix}$$

所以

$$(Ax,x)=a_{ii}>0,\quad i=1,2,\cdots,n$$

证（1） $a_{ij}^2<a_{ii}a_{jj}$

取

$$x=(0,\cdots 0,\overset{i}{a_{jj}},0,\cdots,0,\overset{j}{a_{ij}},0,\cdots,0)^T$$

则

$$\begin{pmatrix} a_{11}\cdots a_{1i}\cdots a_{1j}\cdots a_{1n} \\ \cdots\quad\cdots\quad\cdots\quad\cdots \\ a_{i1}\cdots a_{ii}\cdots a_{ij}\cdots a_{in} \\ \cdots\quad\cdots\quad\cdots\quad\cdots \\ a_{j1}\cdots a_{ji}\cdots a_{jj}\cdots a_{jn} \\ \cdots\quad\cdots\quad\cdots\quad\cdots \\ a_{n1}\cdots a_{ni}\cdots a_{nj}\cdots a_{nn}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\ \vdots\\ a_{jj}\\ \vdots\\ a_{ij}\\ \vdots\\ 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} a_{1i}a_{jj}-a_{1j}a_{ij} \\ \vdots \\ a_{ii}a_{jj}-a_{ij}^2 \\ \vdots \\ a_{ji}a_{jj}-a_{jj}a_{ij} \\ \vdots \\ a_{ni}a_{jj}-a_{nj}a_{ij}\end{pmatrix}\begin{matrix}\\ \\ i\\ \\ j\\ \\ \\ \end{matrix}$$

于是有

$$(Ax,x)=a_{jj}(a_{ii}a_{jj}-a_{ij}^2)>0$$

由上结论知

$$a_{jj}>0$$

所以

$$a_{ij}^2<a_{ii}a_{jj},\quad 1\leqslant i,j\leqslant n$$

证（2）A的主元必在对角线上。用反证法，假如

$$a_{ij} > a_{ii}$$

则由题设 $A = A^T$，有

$$a_{ij} > a_{jj}$$

于是有

$$a_{ij}^2 > a_{ii}a_{jj}$$

与（1）的结论矛盾，于是（2）成立。

习 题 3·3

1 解 设

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ 1 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

用简单消元法，因 $a_{11}^{(1)} = 2 \neq 0$，则存在消元阵L_1，使

$$L_1 A^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ 1 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ 0 & \frac{5}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{7}{2} \end{pmatrix} = A^{(2)}$$

又因 $a_{22}^{(2)} = \frac{5}{2} \neq 0$，故存在消元阵$L_2$，使

$$L_2 A^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{5} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ 0 & \frac{5}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{7}{2} \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}2 & -1 & -1\\ 0 & \frac{5}{2} & \frac{1}{2}\\ 0 & 0 & 3.4\end{pmatrix}=R$$

于是有

$$L_2L_1A=R$$

所以

$$A=L_1^{-1}L_2^{-1}R=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ \frac{1}{2} & 1 & 0\\ \frac{1}{2} & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2 & -1 & -1\\ 0 & \frac{5}{2} & \frac{1}{2}\\ 0 & 0 & 3.4\end{pmatrix}=LR$$

又因为

$$R=\begin{pmatrix}2 & 0 & 0\\ 0 & \frac{5}{2} & 0\\ 0 & 0 & 3.4\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\\ 0 & 1 & \frac{1}{2}\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

所以有

$$A=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ \frac{1}{2} & 1 & 0\\ \frac{1}{2} & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2 & 0 & 0\\ 0 & \frac{5}{2} & 0\\ 0 & 0 & 3.4\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\\ 0 & 1 & \frac{1}{2}\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$=LDU$$

2 证明 因A是n阶对称正定矩阵，故由高等代数知A的各阶主子式之值皆大于0。由第三章§3定理1知存在唯一的单位下三角阵$\widetilde{L}$及上三角阵R，使

$$A=\widetilde{L}R$$

设

$$\widetilde{L}=\begin{pmatrix}1 & & & 0\\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & \cdots & & 1\end{pmatrix},\quad R=\begin{pmatrix}r_{11} & \cdots & r_{1n}\\ & r_{22}\cdots & r_{2n}\\ & & \ddots\ \vdots\\ 0 & & r_{nn}\end{pmatrix}$$

又由A的对称性知

$$A=A^T$$

所以

$$A=R^T\widetilde{L}^T$$

$$=\begin{pmatrix}r_{11} & & 0\\ \vdots & \ddots & \\ r_{1n} & \cdots & r_{nn}\end{pmatrix}\widetilde{L}^T$$

$$=\begin{pmatrix}1 & & & 0\\ u_{12} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ u_{1n} & \cdots & & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}r_{11} & & 0\\ & \ddots & \\ 0 & & r_{nn}\end{pmatrix}\widetilde{L}^T$$

$$=UD\widetilde{L}^T=U\ (D\widetilde{L}^T)$$

其中

$$u_{ij}=r_{ij}/r_{ii}$$

但由 A的 LR分解是唯一的，所以有

$$U=\widetilde{L}$$

所以

$$A=\widetilde{L}D\widetilde{L}^T$$

其中D为对角阵．由A的正定性知

$$r_{ii}>0,\quad i=1,2,\cdots,n$$

所以D又可表为

$$D=D_1D_2$$

其中

$$D_1=D_2=\begin{pmatrix}d_1 & & 0\\ & \ddots & \\ 0 & & d_n\end{pmatrix},\ d_i=\sqrt{r_{ii}},\ i=1,2,\cdots,n$$

令

$$L = \widetilde{L} D_1$$

则

$$L^T = D_1^T \widetilde{L}^T = D_1 \widetilde{L}^T = D_2 \widetilde{L}^T$$

其中

$$D_1^T = D_1$$

所以A可唯一地分解为

$$A = \widetilde{L} D_1 D_2 \widetilde{L}^T = (\widetilde{L} D_1)(D_2 \widetilde{L}^T) = LL^T$$

显然L为下三角形阵．证完．

其次把下列阵A分解为LL^T：

因

$$|A_1| = 2 > 0,\ |A_2| = 3 > 0,\ |A_3| = 1 > 0$$

所以A为对称正定阵，于是有

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} \\ 0 & l_{22} & l_{32} \\ 0 & 0 & l_{33} \end{pmatrix}$$

利用矩阵相乘及两矩阵相等的关系有

$$l_{11}^2 = 2, \qquad l_{11} = \sqrt{2}$$

$$l_{11} l_{21} = -1, \quad l_{21} = -1/\sqrt{2}$$

$$l_{11} l_{31} = -1, \quad l_{31} = -1/\sqrt{2}$$

$$l_{21}^2 + l_{22}^2 = 2, \quad l_{22} = \sqrt{2 - \frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{3}{2}}$$

$$l_{21} l_{31} + l_{22} l_{32} = 0, l_{32} = -l_{21} l_{31}/l_{22} = -\left(\frac{-1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{-1}{\sqrt{2}}\right) / \sqrt{\frac{3}{2}}$$

$$= -\frac{\sqrt{2}}{2\sqrt{3}} = -\frac{1}{\sqrt{6}}$$

$$l_{31}^2 + l_{32}^2 + l_{33}^2 = 1, \qquad l_{33} = \sqrt{1 - l_{31}^2 - l_{32}^2} = \sqrt{1 - \frac{1}{2} - \frac{2}{4 \times 3}}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{3}}$$

于是有

$$A=\begin{pmatrix}\sqrt{2} & 0 & 0\\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \sqrt{\frac{3}{2}} & 0\\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sqrt{2} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\\ 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & -\frac{1}{\sqrt{6}}\\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}}\end{pmatrix}$$

3　**证明**　由题设

$$\boldsymbol{L}=\begin{pmatrix}1 & & & 0\\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & \cdots & l_{n,n-1} & 1\end{pmatrix}$$

为单位下三角阵，则

$$|\boldsymbol{L}|=1$$

且由高等代数知识：

$$\boldsymbol{L}^{-1}=\frac{1}{|\boldsymbol{L}|}\widetilde{\boldsymbol{L}}=\widetilde{\boldsymbol{L}}$$

其中

$$\widetilde{\boldsymbol{L}}=\begin{pmatrix}L_{11} & \cdots & L_{n1}\\ \vdots & & \vdots\\ L_{1n} & \cdots & L_{nn}\end{pmatrix}$$

L_{ij} 为l_{ij}的代数余子式。因为 L 为单位下三角阵，所以

$$L_{ii}=1$$

而当 $i>j$ 时，$L_{ij}=0$。于是

$$\boldsymbol{L}^{-1}=\widetilde{\boldsymbol{L}}=\begin{pmatrix}1 & & 0\\ L_{12} & 1 & \\ \vdots & & \ddots\\ L_{1n} & \cdots & 1\end{pmatrix}$$

而得证$\boldsymbol{L}^{-1}$为单位下三角阵。

再由矩阵乘法运算，显然有单位下三角阵之积仍为下三角阵。如：

$$\begin{pmatrix}1&0&0\\l_{21}&1&0\\l_{31}&l_{32}&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&0\\\beta_{21}&1&0\\\beta_{31}&\beta_{32}&1\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}1&0&0\\l_{21}+\beta_{21}&1&0\\l_{31}+l_{32}\beta_{21}+\beta_{31}&l_{32}+\beta_{32}&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0&0\\r_{21}&1&0\\r_{31}&r_{32}&1\end{pmatrix}$$

证完。

习　题 3·4

1　解：设

$$\begin{pmatrix}2&-1&-1\\-1&2&0\\3&0&3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0&0\\l_{21}&1&0\\l_{31}&l_{32}&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}r_{11}&r_{12}&r_{13}\\0&r_{22}&l_{23}\\0&0&r_{33}\end{pmatrix}$$

利用公式（4.4）求 r_{ij}，l_{ij} $(i,j=1,2,3)$，为了不死记公式（4.4），不妨列表：

r_{11}	r_{12}	r_{13}
l_{21}	r_{22}	r_{23}
l_{31}	l_{32}	r_{33}

$r_{11}=a_{11}=2,\quad r_{12}=a_{12}=-1,\quad r_{13}=a_{13}=-1$

$l_{21}=a_{21}/r_{11}=-\dfrac{1}{2},\qquad l_{31}=a_{31}/r_{11}=3/2$

$r_{22}=a_{22}-l_{21}r_{12}=2-\left(-\dfrac{1}{2}\right)(-1)=\dfrac{3}{2}$

$l_{32}=(a_{32}-l_{31}r_{12})/r_{22}=\left[0-\dfrac{3}{2}(-1)\right]/1.5=1$

$r_{33}=a_{33}-(l_{31}r_{13}+l_{32}r_{23})=$

$=\quad 3-\left[\dfrac{3}{2}(-1)+1\times\left(-\dfrac{1}{2}\right)\right]=5$

所以

$$
\boldsymbol{L}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\dfrac{1}{2} & 1 & 0 \\ -\dfrac{3}{2} & 1 & 1 \end{pmatrix},
$$

$$
\boldsymbol{R}=\begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} \\ 0 & r_{22} & r_{23} \\ 0 & 0 & r_{33} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ 0 & \dfrac{3}{2} & -\dfrac{1}{2} \\ 0 & 0 & 5 \end{pmatrix}
$$

2　解　设

$$
\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{R}
$$

其中

$$
\boldsymbol{L}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \dfrac{r_{12}}{r_{11}} & 1 & 0 \\ \dfrac{r_{13}}{r_{11}} & \dfrac{r_{23}}{r_{22}} & 1 \end{pmatrix},\quad \boldsymbol{R}=\begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} \\ 0 & r_{22} & r_{23} \\ 0 & 0 & r_{33} \end{pmatrix}
$$

按公式（4.9）求r_{ij}：

$$
r_{11}=2,\quad r_{12}=-1,\quad r_{13}=-1
$$

$$
r_{22}=a_{22}-\frac{r_{12}}{r_{11}}r_{12}=2-\left(\frac{-1}{2}\right)(-1)=\frac{3}{2},\left(\frac{r_{12}}{r_{11}}=-\frac{1}{2}\right)
$$

$$
r_{23}=a_{23}-\frac{r_{12}}{r_{11}}r_{13}=0-\left(-\frac{1}{2}\right)(-1)=-\frac{1}{2}
$$

$$
r_{33}=a_{33}-\frac{r_{13}}{r_{11}}r_{13}-\frac{r_{23}}{r_{22}}r_{23}
$$

$$
=1-\left(-\frac{1}{2}\right)(-1)-\left[\left(-\frac{1}{2}\right)/\frac{3}{2}\right]\left(-\frac{1}{2}\right)=\frac{1}{3}
$$

$$
\frac{r_{23}}{r_{22}}=\left(-\frac{1}{2}\right)/\frac{3}{2}=-\frac{1}{3},\quad \frac{r_{13}}{r_{11}}=-\frac{1}{2}
$$

由

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 \\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{3} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

解得

$$y_1 = b_1 = 0$$

$$y_2 = b_2 - \frac{r_{12}}{r_{11}} y_1 = 1 + \frac{1}{2} \times 0 = 1$$

$$y_3 = b_3 - \frac{r_{13}}{r_{11}} y_1 - \frac{r_{23}}{r_{22}} y_2 = 0 - \frac{1}{2} \times 0 + \frac{1}{3} \times 1 = \frac{1}{3}$$

再由

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ 0 & \frac{3}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{1}{3} \end{pmatrix}$$

解得

$$x_3 = y_3 / r_{33} = 1$$

$$x_2 = (y_2 - r_{23}x_3)/r_{22} = 1$$

$$x_1 = (y_1 - r_{12}x_2 - r_{13}x_3)/r_{11} = 1$$

所以得解向量

$$\boldsymbol{x} = (1, 1, 1)^T$$

3　**解**　因为$\boldsymbol{A}$为正定阵且$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^T$，于是有

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^T$$

设

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \cdots a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} \cdots a_{2n} \\ \cdots & \cdots\cdots\cdots\cdots \\ a_{n1} & a_{n2} \cdots a_{nn} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{L} = \begin{pmatrix} l_{11} & & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \\ \vdots & & \ddots \\ l_{n1} & \cdots\cdots & l_{nn} \end{pmatrix}$$

$$L^T=\begin{pmatrix} l_{11} & l_{21}\cdots l_{n1} \\ & l_{22}\cdots l_{n2} \\ & \ddots \vdots \\ 0 & l_{nn} \end{pmatrix}$$

根据矩阵的乘法有

$$A=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots a_{nn} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} l_{11} & & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \\ \vdots & & \ddots \\ l_{n1} & l_{n2}\cdots & l_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_{11} & l_{21}\cdots l_{n1} \\ & l_{22}\cdots l_{n2} \\ & \ddots \vdots \\ 0 & l_{nn} \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} l_{11}^2 & l_{11}l_{21} & \cdots\cdots & \cdots\cdots l_{11}l_{n1} \\ l_{21}l_{11} & l_{21}^2+l_{22}^2\cdots\cdots & & l_{21}l_{n1}+l_{22}l_{n2} \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ l_{n1}l_{11} & l_{n1}l_{21}+l_{21}l_{22}\cdots\cdots & & l_{n1}^2+l_{n2}^2+\cdots+l_{nn}^2 \end{pmatrix}$$

根据矩阵相等的定义，则有：

$$\begin{cases} a_{ij}=l_{i1}l_{j1}+\cdots+l_{ij}l_{jj} & i>j \\ a_{ii}=l_{i1}^2+l_{i2}^2+\cdots+l_{ii}^2 & i,j=1,2,\cdots,n \end{cases}$$

从而得到计算l_{ij}的递推公式：

$$l_{ij}=\begin{cases} (a_{ii}-\sum\limits_{k=1}^{i-1}l_{ik}^2)^{\frac{1}{2}} \\ (a_{ij}-\sum\limits_{k=1}^{i-1}l_{ik}l_{jk})/l_{jj} & i>j \\ 0 & i<j \end{cases}$$

利用 LL^T 分解，求逆矩阵

$$A^{-1}=(L^T)^{-1}L^{-1}=(L^{-1})^TL^{-1}$$

故只要求出 L^{-1}即可。

令 $P=L^{-1}$，则P也是一个下三角阵，设P的元素为P_{ij}（$P_{ij}=0$，当$i<j$ 时），则由

$$Lp=I \text{（单位阵）}$$

可得 p的元素与 L的元素间的关系，即由

$$\begin{pmatrix} l_{11} & & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \\ \cdots & \cdots\cdots & \\ l_{n1} & l_{n2}\cdots l_{nn} & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} p_{11} & & 0 \\ p_{21} & p_{22} & \\ \cdots & \cdots\cdots & \ddots \\ p_{n1} & p_{n2}\cdots p_{nn} & \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ & 1 & \\ & & \ddots \\ 0 & & 1 \end{pmatrix}$$

$$
= \begin{pmatrix} l_{11}p_{11} & & & 0 \\ l_{21}p_{11}+l_{22}p_{21} & l_{22}p_{22} & & \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \ddots & \\ \sum_{k=1}^{n} l_{nk}p_{k1} & \sum_{k=2}^{n} l_{nk}p_{k2} & \cdots & l_{nn}p_{nn} \end{pmatrix}
$$

于是有

$$
l_{ii}p_{ii}=1, \quad \sum_{k=i}^{j} l_{jk}p_{ki}=0
$$

则

$$
\begin{cases} p_{ii}=\dfrac{1}{l_{ii}} \\ p_{ji}=-\left(\sum_{k=i}^{j-1} l_{jk}p_{ki}\right)/l_{jj}, \quad j=i+1,\cdots,n \end{cases}
$$

所以

$$
A^{-1}=p^{T}p
$$

习　　题　3·5

1　解　因为三对角系数阵

$$
A=\begin{pmatrix} -4 & 1 & & 0 \\ 1 & -4 & 1 & \\ & 1 & -4 & 1 \\ 0 & & 1 & -4 \end{pmatrix}
$$

$a_i=1>0$，$c_i=1>0$，$\beta_i=-4<0$

$-\beta_1=4>c_1=1$，$-\beta_n=4>a_n=1$

$-\beta_i=4>a_i+c_i=2$

满足引理全部条件，由定理可知A可唯一的分解为

$$
A=L\cdot R
$$

应用（5.4）计算L，R的元素：

$$\beta_1 = d_1 = -4$$

$$\alpha_2 = a_2/\beta_1 = -\frac{1}{4}$$

$$\beta_2 = d_2 - \alpha_2 c_1 = -4 - \left(-\frac{1}{4}\right) \times 1 = -\frac{15}{4}$$

$$\alpha_3 = a_3/\beta_2 = 1/-\frac{15}{4} = -\frac{4}{15}$$

$$\beta_3 = d_3 - \alpha_3 c_2 = -4 - \left(-\frac{4}{15}\right) \times 1 = -\frac{56}{15}$$

$$\alpha_4 = a_4/\beta_3 = 1/-\frac{56}{15} = -\frac{15}{56}$$

$$\beta_4 = d_4 - \alpha_4 c_3 = -4 - \left(-\frac{15}{56}\right) \times 1 = -\frac{209}{56}$$

其次应用公式（5.7）计算向量 y：

$$y_1 = b_1 = 1$$

$$y_2 = b_2 - \alpha_2 y_1 = 1 + \frac{1}{4} \times 1 = \frac{5}{4}$$

$$y_3 = b_3 - \alpha_3 y_2 = 1 + \frac{4}{15} \times \frac{5}{4} = \frac{4}{3}$$

$$y_4 = b_4 - \alpha_4 y_3 = 1 + \frac{15}{56} \times \frac{4}{3} = \frac{19}{14}$$

利用公式（5.8）求得

$$x_4 = y_4/\beta_4 = \frac{19}{14} \times \left(-\frac{56}{209}\right) = -\frac{76}{209}$$

$$x_3 = \left[\frac{4}{3} - \left(-\frac{76}{209}\right) \times 1\right] \Big/ \left(-\frac{56}{15}\right) = -\frac{285}{627}$$

$$x_2 = \left[\frac{5}{4} - \left(-\frac{285}{627}\right) \times 1\right] \Big/ \left(-\frac{15}{4}\right) = -\frac{57}{129}$$

$$x_1 = \left[1 - \left(-\frac{57}{129}\right) \times 1\right] \Big/ (-4) = -\frac{93}{258}$$

所求方程组的解为

$$x=\left(-\frac{93}{258},\ -\frac{57}{129},\ -\frac{285}{627},\ -\frac{76}{209}\right)^T$$

2　**证明**　因阵A的各阶主子矩阵皆非奇异，由第三章§3定理知存在单位下三角阵L及上三角阵R，使

$$A=L\cdot R$$

且分解是唯一的，再由高等代数内容知，分块阵的运算，从形式上可按一般阵的运算，故由三对角块阵运算法则，必有如下分解：

$$A=L\cdot R=\begin{pmatrix} I_1 & & & 0 \\ \Gamma_2 & I_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ 0 & & \Gamma_k & I_k \end{pmatrix}\begin{pmatrix} D_1 C_1 & & & 0 \\ & D_2\ C_2 & & \\ & & \ddots\ \ddots & C_{k-1} \\ 0 & & & D_k \end{pmatrix}$$

其中I_i为单位阵，D_i为方块阵且非奇异，

将上式右边作乘积，由矩阵相等的定义。得：

$$D_1=A_1$$

$$\Gamma_i=B_iD_{i-1}^{-1}\ （或\Gamma_iD_{i-1}=B_i），\quad i=2,3,\cdots,k$$

$$D_i=A_i-\Gamma_iC_{i-1},\quad i=2,3,\cdots,k$$ 证完。

3*　**解**　设

$$Ax=b$$

即

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 & r_1 & & & \beta_1 \\ \beta_2 & \alpha_2 & r_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & \beta_{n-1} & \alpha_{n-1} & r_{n-1} \\ r_n & & & \beta_n & \alpha_n \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{n-1} \\ b_n \end{pmatrix} \quad (1)$$

如果把x_n暂时看成已知的，则第一个方程

$$\alpha_1x_1+r_1x_2+\beta_1x_n=b_1$$

可化为

$$\alpha_1x_1+r_1x_2=b_1-\beta_1x_n$$

第$n-1$个方程可记为

$$\beta_{n-1}x_{n-2}+\alpha_{n-1}x_{n-1}=b_{n-1}-r_{n-1}x_n$$

暂不考虑第n个方程，则可得$n-1$ 阶方程组

$$B\overline{x}=f \tag{2}$$

其中B为A的$n-1$阶主子式

$$B=\begin{pmatrix} \alpha_1 & r_1 & & & 0 \\ \beta_2 & \alpha_2 & r_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & r_{n-2} \\ 0 & & & \beta_{n-1} & \alpha_{n-1} \end{pmatrix}$$

$$\overline{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_{n-1})^T$$

$$f=(b_1-\beta_1x_n,b_2,\cdots,b_{n-2},b_{n-1}-r_{n-1}x_n)^T$$

可解方程组（2），设

$$g=(b_1,b_2,\cdots,b_{n-2},b_{n-1})^T$$

$$h=(-\beta_1,0,\cdots,0,-r_{n-1})^T$$

于是

$$f=g+x_nh$$

再设

$$\overline{x}=u+x_nv$$

则方程组（2）可变为

$$Bu=g \tag{3}$$

$$Bv=h \tag{4}$$

显然（3），（4）的线性结合，就是方程组（2）。

但（3），（4）是三对角阵方程组，可按公式（5.4）、（5.7）、（5.8）解出。假定已解得（3）的解为u^*。（4）的解为v^*。其分量分别为u_i^*，v_i^*，从而

$$\overline{x}=u^*+x_nv^*,\text{即}x_i=u_i^*+x_nv_i^*\ ,i=1,2,\cdots,n-1 \tag{5}$$

而原方程的第n个方程为

$$r_nx_1+\beta_nx_{n-1}+\alpha_nx_n=b_n$$

所以

$$r_n(u_1^* + x_n v_1^*) + \beta_n(u^*_{n-1} + x_n v^*_{n-1}) + \alpha_n x_n = b_n$$

u_i^*，v_i^*为已知，由此解出x_n，代入（5）即得$\bar{x}$。而原方程的解

$$x^* = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T$$

4　证　显然所给阵A是对称的，用数学归纳法可以证明。记$-A$的k阶主子式为Δ_k，显然

$$\Delta_2 = (-\beta_1)(-\beta_2) - C_1^2 > 0$$

假定满足定理条件的$k-1$阶主子式$\Delta_{k-1}>0$，则在k阶主子式中，由第$k-1$行加上第k行的C_{k-1}/β_k倍，使$(k-1,k)$处的元素为0，则第$k-1$行成为

$$(0, \cdots, 0, C_{k-1}, \bar{\beta}_{k-1}, 0)$$

其中　$\bar{\beta}_{k-1} = -\beta_{k-1} - C_{k-1}\dfrac{C_{k-1}}{\beta_k}$，于是

$$\Delta_k = -\beta_k \begin{vmatrix} -\beta_1 & -C_1 & & & \\ -C_1 & -\beta_2 & -C_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -C_{k-3} & -\beta_{k-2} & C_{k-2} \\ & & & -C_{k-2} & \bar{\beta}_{k-1} \end{vmatrix}$$

因为

$$|\bar{\beta}_{k-1}| > |-\beta_{k-1}| - \frac{C_{k-1}^2}{|\beta_k|} = |\beta_{k-1}| - \frac{C_{k-1}}{|\beta_k|}$$

$$\cdot C_{k-1} > |\beta_{k-1}| - C_{k-1} > C_{k-2}$$

所以上行列式满足假定条件，所以　$\Delta_{k-1} > 0$。于是有

$$\Delta_k = -\beta_k \Delta_{k-1} > 0$$

由于$-A$的各阶主子式>0，故$-A$是正定的，从而A是负定的。证完。

习　　题　3·6

1　证明　设阵A的逆存在，即$AA^{-1}=I$。因(6.6)是

列主元法，于是存在非奇异置换阵 $\boldsymbol{P}$，有

$$\boldsymbol{PA}=\boldsymbol{LR}$$

于是

$$(\boldsymbol{PA})^{-1}=(\boldsymbol{LR})^{T}$$

即

$$\boldsymbol{A}^{-1}=\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{P}=(\boldsymbol{PA})^{-1}\boldsymbol{P}$$ 证完.

2　解（1）因为$\boldsymbol{A}$对称正定且 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LL}^{T}$，

$$\boldsymbol{A}^{-1}=(\boldsymbol{LL}^{T})^{-1}=(\boldsymbol{L}^{T})^{-1}\boldsymbol{L}^{-1}=(\boldsymbol{L}^{-1})^{T}\boldsymbol{L}^{-1}$$

所以只要求出 $\boldsymbol{L}^{-1}$，$\boldsymbol{A}^{-1}$ 就可以了，现在的问题是已知 $\boldsymbol{L}$ 求 $\boldsymbol{L}^{-1}$. 设$\boldsymbol{P}=\boldsymbol{L}^{-1}$，其中$\boldsymbol{P}$是下三角阵，其元素为 P_{ij}，则由习题3.4第3题知

$$P_{ii}=1/l_{ii}$$

$$p_{ji}=-(\sum_{k=i}^{j-1}l_{jk}p_{ki})/l_{jj},\quad j=i+1,\cdots,n$$

于是有

$$\boldsymbol{A}^{-1}=\boldsymbol{P}^{T}\boldsymbol{P}$$

（2）证明　因为 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LL}^{T}$，所以

$$\begin{aligned}|\boldsymbol{A}|&=|\boldsymbol{LL}^{T}|\\&=|\boldsymbol{L}||\boldsymbol{L}^{T}|\\&=(l_{11}l_{22}\cdots l_{nn})(l_{11}l_{22}\cdots l_{nn})\\&=(l_{11}l_{22}\cdots l_{nn})^{2}\end{aligned}$$

其中l_{ii}为$\boldsymbol{L}$的对角元素. 证完.

习　题　3·7

1　解　因

1°　$\boldsymbol{x}=(1,-2,3)^{T}$

故三种常用的范数是：

（Ⅰ）$\|\boldsymbol{x}\|_{1}=|x_{1}|+|x_{2}|+|x_{3}|=1+|-2|+|3|=6$

(Ⅱ) $\|x\|_2=\sqrt{x_1^2+x_2^2+x_3^2}=\sqrt{1+(-2)^2+3^2}=\sqrt{14}$

(Ⅲ) $\|x\|_\infty=\max\limits_i|x_i|=3$, $1\leqslant i\leqslant 3$.

2° $y=(0,\ 2,\ 3)^T$

(Ⅰ) $\|y\|_1=|0|+|2|+|3|=5$.

(Ⅱ) $\|y\|_2=\sqrt{0^2+2^2+3^2}=\sqrt{13}$.

(Ⅲ) $\|y\|_\infty=\max\limits_i|x_i|=3$, $1\leqslant i\leqslant 3$.

2 解 不一定，例如在二维空间内，设

$$x_k=((-1)^k,0)^T,\ a=(1,0)^T$$

显然

$$\lim_{k\to\infty}\|x_k\|_1=\|a\|_1$$

但

$$\lim_{k\to\infty}x_k\neq a$$

3 解 （1）$C_1=\{x/\|x\|_\infty=1,x\in R^3\}$的几何意义是于$R^3$中、棱长为2，以正六面体的中心为坐标原点的正六面体的表面，如图1。

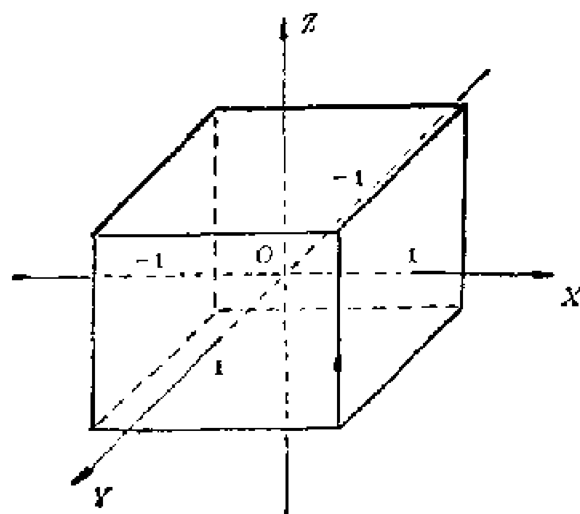


图1

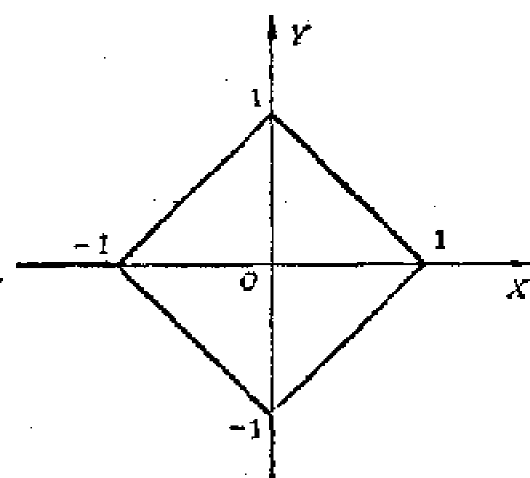


图2

（2）$C_2=\{x \mid \|x\|_1=1, x\in R^2\}$的几何意义是表示 $R^{(2)}$ 平面上以0为中心，$\sqrt{2}$为边长的一个四边形．如图2．

4　解　（1）$\|A\|_\infty=\max_i \sum_{j=1}^{3}|a_{ij}|$

$$=|-1|+|2|+|3|=6$$

（2）$\|A\|_1=\max_j \sum_{i=1}^{3}|a_{ij}|$

$$=|1|+|2|+|-2|=5$$

（3）$\|A\|_2=\sqrt{\lambda_1}$

其中λ_1是A^TA特征值最大者，

$$A^TA=\begin{pmatrix}2 & -1 & 0\\ 1 & 2 & -2\\ 0 & 3 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2 & 1 & 0\\ -1 & 2 & 3\\ 0 & -2 & 1\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}5 & 0 & -3\\ 0 & 9 & 4\\ -3 & 4 & 10\end{pmatrix}$$

设

$$P(\lambda)=|\lambda E-A^TA|=\begin{vmatrix}\lambda-5 & 0 & 3\\ 0 & \lambda-9 & -4\\ 3 & -4 & \lambda-10\end{vmatrix}=0$$

解方程$P(\lambda)=\lambda^3-24\lambda^2+160\lambda-289=0$，求得

$$\lambda_1=\max_i|\lambda_i|\doteq 14.12$$

所以

$$\|A\|_2=\sqrt{\lambda_1}\doteq\sqrt{14.12}\doteq 3.76$$

5　证明　因为

$$\|x_k-x^*\|\to 0$$

$$\|A_k-A\|\to 0$$

而

$$\|A_k x_k - Ax^*\| = \|(A_k - A)x_k + A(x_k - x^*)\|$$
$$\leqslant \|A_k - A\|\|x_k\| + \|A\|\|x_k - x^*\| \to 0,$$
$$k \to \infty$$

所以

$$\lim_{k\to\infty} A_k x_k = Ax^*$$ 证完

6 证明 因为$A = A^T$，$B = B^T$，于是有

$$\|A\|_2 = \rho(A) = \max_{1\leqslant i\leqslant n}|\lambda_i| = \lambda_1$$

$$\|B\|_2 = \rho(B) = \max_{1\leqslant i\leqslant n}|\bar{\lambda}_i| = \bar{\lambda}_1$$

由于

$$A + B = (A + B)^T$$

所以

$$\rho(A + B) = \|A + B\|_2 \leqslant \|A\|_2 + \|B\|_2 = \rho(A) + \rho(B)$$

证完。

7 证明 设λ_i为A的特征值，因为

$$\|A\| < 1$$

所以

$$|\lambda_i| \leqslant \|A\| < 1, \quad i = 1, 2, \cdots, n$$

故 $I - A$ 非奇异。因为

$$(I - A)(I + A + A^2 + \cdots + A^k) = I - A^{k+1}$$

用$(I - A)^{-1}$ 左乘以等式两边，且由于

$$\lim_{k\to\infty} A^{k+1} = 0$$

则有

$$(I - A)^{-1} = I + A + A^2 + \cdots\cdots$$

所以

$$\|(I - A)^{-1}\| \leqslant \|I\| + \|A\| + \|A\|^2 + \cdots\cdots$$
$$= \frac{1}{1 - \|A\|} \qquad (\|A\| < 1)$$

从而有

$$\|(I-A)^{-1}\| \leqslant \frac{1}{1-\|A\|}$$ 证完。

8 **证明** 因为

$$I = A^{-1}A$$

所以

$$1 = \|A^{-1}A\| \leqslant \|A^{-1}\| \cdot \|A\|$$

于是有

$$\|A^{-1}\| \geqslant \frac{1}{\|A\|}$$ 证完。

9 **证明** 因为

$$A = I - B$$

其中

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & -0.4 & -0.7 \\ -0.1 & 0 & -0.2 \\ -0.3 & -0.2 & 0 \end{pmatrix}$$

而

$$\|B\|_1 = \max_j \sum_{i=1}^{3} |b_{ij}| = 0.7 + 0.2 = 0.9 < 1$$

所以由 7 题知

$$I - B = A$$

为非奇异。因 $\|A\|_1 = 1.9$，所以由第 8 题

$$\|A^{-1}\|_1 \geqslant \frac{1}{\|A\|_1} = \frac{1}{1.9}$$

即$\frac{1}{1.9}$为$\|A^{-1}\|_1$的一个下界。

10 **解** 因为

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} -2001 & 2000 \\ 1001 & -1000 \end{pmatrix}$$

于是在$\|\cdot\|_1$ 意义下

$$\|A\|_1=4.001,\quad \|A^{-1}\|_1=3002$$

$$\text{cond}(A)=12011.002$$

在$\|\cdot\|_\infty$意义下

$$\|A\|_\infty=3.002,\quad \|A^{-1}\|_\infty=4001$$

$$\text{cond}(A)=12011.002$$

11　证明　首先对$x\in R^n$，定义$\|x\|_A=\|Ax\|$是$R^n\to R^n$之一映射，这是因为由于A是非奇异的，所以对任一$x\in R^n$，$Ax\in R^n$是唯一确定的。而$\|\cdot\|$是R^n中定义了的范数。所以

$$Ax\to\|Ax\|$$

是R^n到实数域上的一映射，于是

$$x\to\|Ax\|$$

是R^n到实数域上的一个映射，

其次验证$\|x\|_A$满足范数三个条件：

1°　显然　$\|x\|_A=\|Ax\|\geqslant 0$，非负。且若$x=0$时，则$Ax=0$。故有

$$\|x\|_A=\|Ax\|=0$$

若$x\neq 0$时，因A非奇异，所以$Ax\neq 0$，即有

$$\|x\|_A=\|Ax\|>0$$

2°　齐次性，对任意实数k

$$\begin{aligned}\|kx\|_A&=\|A(kx)\|\\&=\|k(Ax)\|\\&=|k|\,\|Ax\|\\&=|k|\,\|x\|_A\end{aligned}$$

3°　三角不等式，对于$x,y\in R^n$

$$\begin{aligned}\|x+y\|_A&=\|A(x+y)\|\\&=\|Ax+Ay\|\\&\leqslant\|Ax\|+\|Ay\|\\&=\|x\|_A+\|y\|_A\end{aligned}$$

这就验证了$\|x\|_A$满足定义1的1°、2°、3°条件，从而知$\|x\|_A$是

R^n 中的一种范数.

12 证明 考虑行列式

$$|A^{-1}||A+\delta A| = |A^{-1}(A+\delta A)|$$
$$= |A^{-1}A + A^{-1}\delta A|$$
$$= |I + A^{-1}\delta A|$$

因当 $\|A^{-1}\delta A\| < 1$时，知$I + A^{-1}\delta A$可逆.

$$|A^{-1}||A+\delta A| = |I + A^{-1}\delta A| \neq 0$$

所以

$$|A+\delta A| \neq 0$$

从而阵 $A+\delta A$可逆.

习 题 3·8

1 解（1）先将方程变形，以7,8,9 分别除三个方程两边，得

$$\begin{pmatrix} 1 & 0.143 & 0.286 \\ 0.250 & 1 & 0.250 \\ 0.222 & 0.222 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.429 \\ 1 \\ 0.667 \end{pmatrix}$$

从而

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -0.143 & -0.286 \\ -0.250 & 0 & -0.250 \\ -0.222 & -0.222 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1.429 \\ 1 \\ 0.667 \end{pmatrix}$$

由于

$$\|B\| = \max_i \sum_{j=1}^{3} |b_{ij}| = |-0.250| + |-0.250|$$
$$= 0.500 < 1$$

故对任意初始向量x_0，迭代程序收敛，今取

$$x_0=(1.429,1,0.667)^T$$

作迭代，列表计算如下：

	x_1	x_2	x_3	f_i
	0	-0.143	-0.286	1.492
	-0.250	0	-0.250	1
	-0.222	-0.222	0	0.667
x_0	1.429	1	0.667	
x_1	1.095	0.476	0.128	
x_2	1.324	0.694	0.318	
x_3	1.329	0.590	0.219	
x_4	1.282	0.636	0.261	
x_5	1.263	0.614	0.241	
x_6	1.272	0.625	0.251	
x_7	1.269	0.619	0.246	
x_8	1.270	0.622	0.248	
x_9	1.269	0.621	0.247	
x_{10}	1.269	0.621	0.247	

因为 $x_9=x_{10}$满足精度要求，故停止计算，取x_{10}为所求方程组的近似解，即

$$x^*\doteq(1.269,0.621,0.247)^T$$

（2）**解** 由于

$$\|B\|_\infty=\max_i\sum_{j=1}^n|b_{ij}|=0.36<1$$

满足定理2的收敛条件，故对任意初始向量 x_0，迭代程序收敛，今取 $x_0=(1,0,0)^T$按(8.5)作迭代，列表计算如下：

	x_1	x_2	x_3	f_i
	0.1	0.2	-0.04	1
	-0.2	0.06	0.1	0
	0.05	0.1	0.03	0
x_0	1	0	0	
x_1	1.1	-0.2	0.05	
x_2	1.068	-0.227	0.0365	
x_3	1.0599	-0.2236	0.03179	
x_4	1.0599	-0.2222	0.0316	
x_5	1.0603	-0.2244	0.0317	
x_6	1.0599	-0.2224	0.0315	
x_7	1.0603	-0.2222	0.0317	
x_8	1.0603	-0.2222	0.0317	

因为在所要求的精确度内 $x_7 = x_8 = (1.0603, -0.2222, 0.0317)^T$，故停止计算，所要求的近似解为

$$x^* \doteq (1.0603, -0.2222, 0.0317)^T$$

2 **解** 因为

$$x_{k+1} = x_k + \alpha(b - Ax_k) \tag{1}$$

则有

$$x_{k+1} = x_k + \alpha b - \alpha A x_k = (I - \alpha A)x_k + \alpha b$$

若使（1）收敛，则只要

$$\rho(I - \alpha A) < 1$$

设A的特征值为λ，因A对称正定，故$\lambda > 0$，而 $I - \alpha A$ 的特征值为$1 - \alpha\lambda$. $|1 - \alpha\lambda| < 1$的充要条件是

$$0 < \alpha < \frac{2}{\lambda}$$

设$\rho(A) = \lambda_1$，则当

$$0 < \alpha < \frac{2}{\rho(A)}$$

时，

$$\rho(I - \alpha A) < 1$$

当然

$$0 < \alpha < \frac{2}{\|A\|}$$

时，也有

$$\rho(I - \alpha A) < 1$$

此时迭代序列（1）收敛。

现在用此法解所给方程组，因$\|A\|_\infty = 4$，故当

$$0 < \alpha < \frac{2}{4} = \frac{1}{2}$$

时，所给迭代程序收敛．今取 $\alpha = \frac{1}{4}$作迭代，其迭代程序为

$$x_{k+1} = (I - \frac{1}{4}A)x_k + \frac{1}{4}b = (I - 0.25A)x_k + 0.25b$$

但由于 $\rho(B) \doteq 0.98$接近于1，为此收敛很慢，从任意初始值出发计算量很大，其解为

$$x^* \doteq (0.9920, 0.9956, 09900)^T$$

实际该方程组的精确解为

$$x^* = (1, 1, 1)^T$$

3　解　方程组（8.1）的迭代程序为（8.2）

$$x_{k+1} = Bx_k + f$$

取 $x_0 = 0$，则

$$x_1 = Bx_0 + f = f$$

$$x_2 = f + Bx_1 = f + Bf$$

$$x_3 = f + Bx_2 = f + Bf + B^2 f$$

…………………………………………

$$x_{k+1} = f + Bf + B^2 f + \cdots + B^k f$$

因为当$\rho(B) < 1$时，

$$B^k \to 0 \quad (k \to \infty)$$

$$x_{k+1} \to x^* \quad (k \to \infty)$$

所以有

$$x^* = f + Bf + B^2 f + \cdots + B^k f + B^{k+1} f + \cdots$$

这种迭代程序在迭代过程中不用每次都加常数项，为此比较简单，但初始值必须取$x_0 = 0$。

习　题　3·9

1 (1) 解　此方程组的系数阵为对称正定阵，故 G—S 迭代收敛，设$A = D - L - L^T$，则 $G-S$迭代矩阵

$$G = (D - L)^{-1} L^T$$

$$= \left(\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right)^{-1} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

其G—S迭代程序为

$$x_{k+1} = Gx_k + f$$

由于 $\|G\|_\infty = 1$，为此收敛很慢，任给初始值 x_0，计算结

果为

$$x^* \doteq (0.9990, 09995, 0.9990)^T$$

该方程组的精确解为

$$x^* = (1,\ 1,\ 1)^T$$

（2）解　此方程组的系数阵为强对角占优，故 $G-S$ 迭代收敛．先以7,8,9分别除以方程组两边，得

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{7} & \frac{2}{7} \\ \frac{1}{8} & 1 & \frac{1}{4} \\ \frac{2}{9} & \frac{2}{9} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{10}{7} \\ 1 \\ \frac{2}{3} \end{pmatrix}$$

于是得原方程组的等价方程组

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{7} & -\frac{2}{7} \\ -\frac{1}{8} & 0 & -\frac{1}{4} \\ -\frac{2}{9} & -\frac{2}{9} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{10}{7} \\ 1 \\ \frac{2}{3} \end{pmatrix}$$

为了便于计算写成小数形式（精确到 10^{-3}）

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -0.143 & -0.286 \\ -0.125 & 0 & -0.250 \\ -0.222 & -0.222 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1.429 \\ 1 \\ 0.667 \end{pmatrix}$$

任选取初始值，计算结果为

$$x^* \doteq (1.255, 0790, 0.213)^T$$

此方程组的精确为

$$x^* = (1.2551, 0.7900, 0.2122)^T$$

2　解　把方程组（8.4）中的系数阵 A_1 分解为

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -2 \\ 1 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -2 & 2 \\ -1 & 0 & -1 \\ -2 & -2 & 0 \end{pmatrix}$$

$$= D - B$$

其中

$$B = \begin{pmatrix} 0 & -2 & 2 \\ -1 & 0 & -1 \\ -2 & -2 & 0 \end{pmatrix}$$

为雅可比迭代矩阵。因为

$$\|B\|_\infty = 4 > 1$$

此时不满足定理 2，但并不能肯定雅可比迭代法一定不收敛，故必须根据定理 1 的充要条件判定。

设阵B 的特征方程

$$\varphi(\lambda) = |\lambda I - B|$$

$$= \begin{vmatrix} \lambda & 2 & -2 \\ 1 & \lambda & 1 \\ 2 & 2 & \lambda \end{vmatrix}$$

$$= \lambda^3 - 4 + 4 + 4\lambda - 2\lambda - 2\lambda$$

$$= \lambda^3 = 0$$

所以　　$\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = 0$，即

$$\rho(B) = 0 < 1$$

所以使用雅可比迭代法收敛。

其次再把阵B 分解为

$$B = \begin{pmatrix} 0 & -2 & 2 \\ -1 & 0 & -1 \\ -2 & -2 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -2 & 2 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$= L + U$$

所以有

$$A = D - L - U$$

于是采德尔迭代矩阵为

$$G=(D-L)^{-1}U$$

$$=\left(\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}0&0&0\\-1&0&0\\-2&-2&0\end{pmatrix}\right)^{-1}\cdot\begin{pmatrix}0&-2&2\\0&0&-1\\0&0&0\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}1&0&0\\1&1&0\\2&2&1\end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix}0&-2&2\\0&0&-1\\0&0&0\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}1&0&0\\-1&1&0\\0&-2&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&-2&2\\0&0&-1\\0&0&0\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}0&-2&2\\0&2&-3\\0&0&2\end{pmatrix}$$

G 为三角形阵，其对角元即为其特征值。故有

$$\rho(G)=2>1$$

所以使用采德尔迭代程序为发散的。

结论：A_1对雅可比方法收敛，对G—S 方法不收敛。

对 A_2 也作类似分析。设

$$A_2=D-M$$

$$=\begin{pmatrix}2&0&0\\0&1&0\\0&0&-2\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}0&1&-1\\-1&0&-1\\-1&-1&0\end{pmatrix}$$

则雅可比迭代矩阵为

$$B=D^{-1}M$$

$$=\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 \\ -1 & 0 & -1 \\ -1 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -1 & 0 & -1 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}$$

因为 $\|B\|_\infty = 2 > 1$ 不满足收敛充分条件，而

$$\varphi(\lambda) = |\lambda I - B|$$

$$=\begin{vmatrix} \lambda & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 1 & \lambda & 1 \\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \lambda \end{vmatrix}$$

$$=\lambda^3 - \frac{1}{4} + \frac{1}{4} + \frac{1}{4}\lambda + \frac{1}{2}\lambda + \frac{1}{2}\lambda$$

$$=\lambda^3 + \frac{5}{4}\lambda = \lambda(\lambda^2 + \frac{5}{4}) = 0$$

则

$$\rho(B) = \frac{\sqrt{5}}{2} > 1$$

故雅可比迭代法不收敛。

又因为$G—S$迭代矩阵

$$G = (D - L)^{-1}U$$

$$=\left(\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \end{pmatrix}\right)^{-1}\begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & -2 \end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

所以$\|G\|_\infty = 1$不满足收敛的充分条件，而

$$\varphi(\lambda) = |\lambda I - G|$$

$$=\begin{vmatrix} \lambda & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & \lambda+\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & \lambda+\frac{1}{2} \end{vmatrix} = \lambda\left(\lambda+\frac{1}{2}\right)^2 = 0$$

所以 $\rho(G) = \frac{1}{2} < 1$，故 G—S 方法收敛．

结论：A_2对雅可比方法不收敛，G—S 方法收敛．

习　题　3·10

1 （1）解　因为

$$x_k = x_{k-1} + \alpha_{k-1} S_{k-1}$$

所以

$$
\begin{aligned}
(\boldsymbol{x}_k,\ \boldsymbol{A}\boldsymbol{S}_k) &= (\boldsymbol{x}_{k-1} + \alpha_{k-1}\boldsymbol{S}_{k-1}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{S}_k) \\
&= (\boldsymbol{x}_{k-1}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{S}_k) + \alpha_{k-1}(\boldsymbol{S}_{k-1}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{S}_k) \\
&= (\boldsymbol{x}_{k-1}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{S}_k) \\
&= (\boldsymbol{x}_{k-2}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{S}_k) + \alpha_{k-2}(\boldsymbol{S}_{k-2}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{S}_k) \\
&\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\
&= (\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{A}\boldsymbol{S}_k) + \alpha_0(\boldsymbol{S}_0, \boldsymbol{A}\boldsymbol{S}_k) \\
&= (\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{A}\boldsymbol{S}_k) = 0 \quad (\text{因}\ \boldsymbol{x}_0 = 0)
\end{aligned}
$$

（2）因为

$$\boldsymbol{S}_{k-1} = \boldsymbol{r}_{k-1} + \beta_{k-2}\boldsymbol{S}_{k-2}$$

所以

$$
\begin{aligned}
(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{S}_{k-1}) &= (\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_{k-1} + \beta_{k-2}\boldsymbol{S}_{k-2}) \\
&= (\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_{k-1}) + \beta_{k-2}(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{S}_{k-2}) \\
&= \beta_{k-2}(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{S}_{k-2}) \\
&= \beta_{k-2}\beta_{k-3}(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{S}_{k-3}) \\
&\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\
&= \beta_{k-2}\beta_{k-3}\cdots\beta_0(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{S}_0) \\
&= \beta_{k-2}\beta_{k-3}\cdots\beta_0(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_0) \\
&= 0 \quad (k \geqslant 1,\ \boldsymbol{S}_0 = \boldsymbol{r}_0)
\end{aligned}
$$

（3）设向量 $\boldsymbol{x}$ 的误差函数

$$H(\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*), \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*)$$

$$\boldsymbol{U}_k = \boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}^*$$

因为

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k\boldsymbol{S}_k$$

则

$$\boldsymbol{U}_{k+1} = \boldsymbol{U}_k + \alpha_k\boldsymbol{S}_k$$

所以

$$
\begin{aligned}
H(\boldsymbol{x}_{k+1}) &= (\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}_{k+1}, \boldsymbol{U}_{k+1}) \\
&= (\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}_k, \boldsymbol{U}_k) + 2\alpha_k(\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}_k, \boldsymbol{S}_k) + \alpha_k^2(\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}_k, \boldsymbol{S}_k)
\end{aligned}
$$

由于

$$(AU_k, S_k) = -(r_k, S_k) = -(r_k, r_k)$$

$$\alpha_k = \frac{(r_k, r_k)}{(AS_k, S_k)}$$

于是有

$$H(x_{k-1}) = (AU_k, U_k) - \frac{(r_k, r_k)^2}{(AS_k, S_k)}$$

$$< (AU_k, U_k)$$

$$= H(x_k)$$

因为A是对称正定阵，易知有

$$\lambda_n(U, U) \leqslant (AU, U)$$

所以

$$\|U_{k+1}\|_2 < \|U_k\|_2$$

即

$$\|x_{k+1} - x^*\|_2 < \|x_k - x^*\|_2$$

（4）证明　因为

$$S_i = r_i + \beta_{i-1} S_{i-1}$$

$$= r_i + \beta_{i-1}(r_{i-1} + \beta_{i-2} S_{i-2})$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$= r_i + \beta_{i-1} r_{i-1} + \beta_{i-1}\beta_{i-2} r_{i-2} + \cdots$$

$$+ \beta_{i-1}\beta_{i-2}\cdots\beta_0 r_0$$

同理

$$S_k = r_k + \beta_{k-1} r_{k-1} + \beta_{k-1}\beta_{k-2} r_{k-2} + \cdots$$

$$+ \beta_{k-1}\beta_{k-2}\cdots\beta_0 r_0$$

并注意到　$r_0, r_1, \cdots, r_i$ 的正交性，因 $k<i$，所以

$$(S_k, S_i) = \beta_{i-1}\beta_{i-2}\cdots\beta_k(r_k, r_k) + \beta_{i-1}\beta_{i-2}\cdots$$

$$\beta_{k-1}^2(r_{k-1}, r_{k-1}) + \cdots\cdots +$$

$$+ \beta_{i-1}\beta_{i-2}\cdots\beta_k\beta_{k-1}^2\beta_{k-2}^2\cdots\beta_0^2(r_0, r_0) \quad (*)$$

因为 $\beta_i > 0$，$(r_i, r_i) > 0$，$i = 0, 1, 2\cdots, k$　则（*）式右端诸项皆为正数。

所以有

$$(S_k, S_i) > 0 \quad (k < i) \qquad \text{证完.}$$

2 解 取 $x_0 = (0,\ 0,\ 0)^T$，列表计算如下：

	x_1	x_2	x_3	(r_k, r_k)	(r_k, r_i)	(AS_k, S_k)	(AS_k, S_i)	α_k	β_k
	2	2	−2						
	2	5	−4						
	−2	−4	5						
b	2	1	1						
x_0	0	0	0						
$r_0 = b - Ax_0$	2	1	1	6					
$S_0 = r_0$	2	1	1						
AS_0	4	5	−3			10		0.6	
$x_1 = x_0 + \alpha_0 S_0$	1.2	0.6	0.6						
$r_1 = b - Ax_1$	−0.4	−2	2.8	12	1.6				2
$S_1 = r_1 + \beta_0 S_0$	3.6	0	4.8						
AS_1	−2.4	−12	16.8			72	0	$\frac{1}{6}$	
$x_2 = x_1 + \alpha_1 S_1$	1.8	0.6	1.4						
$r_2 = b - Ax_2$	0	0	0						

所以方程组的解为

$$x_2 = (1.8,\ 0.6,\ 1.4)^T = x^*$$

3　证明　依题意设

$$S=(S_0,S_1,\cdots,S_{n-1})$$

所以

$$S^TAS=\begin{pmatrix}S_0^T\\S_1^T\\\vdots\\S_{n-1}^T\end{pmatrix}A(S_0,S_1,\cdots,S_{n-1})$$

$$=\begin{pmatrix}S_0^TAS_0 & S_0^TAS_1 & \cdots S_0^TAS_{n-1}\\S_1^TAS_0 & S_1^TAS_1 & \cdots S_1^TAS_{n-1}\\\cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots\\S_{n-1}^TAS_0 & S_{n-1}^TAS_1 & \cdots S_{n-1}^TAS_{n-1}\end{pmatrix}$$

但因为向量组　$S_0,S_1,\cdots,S_{n-1}$ 为A正交的，故有

$$S_i^TAS_j=(AS_i,S_j)=0,\quad i\neq j$$

从而

$$S^TAS=\begin{pmatrix}S_0^TAS_0 & & & 0\\ & S_1^TAS_1 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & S_{n-1}^TAS_{n-1}\end{pmatrix}$$

于是设 $S^TAS=\overline{D}$，其中$\overline{D}$为对角阵。

其次证明 $A^{-1}=S\overline{D}^{-1}S^T$

因为

$$S^TAS=\overline{D}$$

所以

$$S^TAS\overline{D}^{-1}=I$$

又因

$$AS\overline{D}^{-1}=(S^T)^{-1}$$

$$S\overline{D}^{-1}=A^{-1}(S^T)^{-1}$$

所以　$S\overline{D}^{-1}S^T=A^{-1}$

即

$$A^{-1}=S\overline{D}^{-1}S^T$$　　证完。

习 题 3·11

1 求阵A的特征值，取 $x_0=(2,-1,-1)^T$

列表计算如下：

	$\begin{matrix}2\\-1\\-1\end{matrix}$	$\begin{matrix}-1\\2\\0\end{matrix}$	$\begin{matrix}-1\\0\\1\end{matrix}$		$\begin{matrix}2\\-1\\-1\end{matrix}$	$\begin{matrix}-1\\2\\0\end{matrix}$	$\begin{matrix}-1\\0\\1\end{matrix}$
x_0	2	−1	−1	x_8	21794	−17460	−9707
x_1	6	−4	−3	x_9	70755	−56714	−31501
x_2	19	−14	−9	x_{10}	229725	−184183	−102256
x_3	61	−47	−28	x_{11}	745889	−598091	−331981
x_4	197	−155	−89	x_{12}	2421850	−1942071	−1077870
x_5	638	−507	−280	x_{13}	7863641	−6305992	−3499720
x_6	2069	−1652	−924	$\dfrac{x_i^{(13)}}{x_i^{(12)}}$	3.246956	3.247045	3.246885
x_7	6714	−5373	−2993				

从迭代向量的分量的数值变化规律发现是属于第一种情况，所以 $\lambda_1 \doteq 3.2470$

对应于λ_1的特征向量

$$x_{12}=(2421950,-1942071,-1077870)^T$$

即 $$x_1=(1,-0.8019,-0.4451)^T$$

其次求A的最小特征值和相应的特征向量．因为A的最大特征值 $\lambda_1=3.2470$，故取 $\mu=4$ 作

$$\widetilde{B}=\mu I-A=\begin{pmatrix}4&0&0\\0&4&0\\0&0&4\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}2&-1&-1\\-1&2&0\\-1&0&1\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}2&1&1\\1&2&0\\1&0&3\end{pmatrix}$$

取　$x_0=(1,1,1)^T$，列表计算如下：

	2 1 1	1 2 0	1 0 3
x_0	1	1	1
x_1	4	3	4
x_2	15	10	16
x_3	56	35	63
x_4	210	126	245
x_5	791	426	945
x_6	2953	1643	3626
x_7	11175	6239	13831
x_8	42420	23653	52668
x_9	161161	89726	200424

x_{10}	612472	340613	762433
$\frac{x_i^{(10)}}{x_i^{(9)}}$	3.800	3.796	3.800

从迭代向量的分量的数值变化规律发现是属于第一种情况，为了加快进度而应用加快公式

$$C_1 = \frac{(x_{10}, x_{10})}{(x_{10}, x_9)} \doteq \frac{1.0188 \times 10^{12}}{2.8208 \times 10^{11}} \doteq 3.612$$

所以 $\lambda_n = \mu - C_1 \doteq 4 - 3.612 = 0.388$

其次求λ_n所对应的特征向量.

因为$\widetilde{B}$的最大特征值为$C_1 \doteq 3.612$，所对应的特征向量为$x_9 = (161161, 89726, 200424)^T$，规格化为$(0.80,\ 0.45,\ 1)^T$

由于

$$C_1 x = \widetilde{B} x$$

所以

$$(\mu - \lambda_n) x = (\mu I - A) x$$

$$-\lambda_n x + \mu x = -A x + \mu x$$

所以

$$\lambda_n x = A x$$

以上说明与C_1所对应$\widetilde{B}$的特征向量 x，就是与 λ_n 所对应 A 的特征向量 x，所以 A 的最小特征值 λ_n 所对应的特征向量为

$$(0.8,\ 0.45,\ 1)^T$$

2 解 求阵 B 的特征值。取 $x_0 = (1,\ 0,\ 0)^T$ 列表计算如下：

	5	4	-4
	11	8	-8
	13	13	-12
x_0	1	0	0
x_1	5	11	13
x_2	17	39	52
x_3	33	83	104
x_4	81	195	260
x_5	145	371	468
x_6	337	819	1092
x_7	593	1523	1924
x_8	1361	3315	4420
x_9	2385	6163	7748
$\frac{x_i^{(9)}}{x_i^{(7)}}$	4.02	4.03	4.03

从迭代向量的分量的数值变化规律发现是属于第二种情况，

$$\lambda^2 = 4.03,\ \lambda_1 \doteq 2.0,\ \lambda_2 \doteq -2.0$$

对应于 λ_1 的特征向量

$$x_1 = x_9 + 2x_8 \doteq (5107, 12793, 16588)^T$$

将 x_1 标准化为

$$x_1' \doteq (0.3079,\ 0.7712,\ 1)^T$$

对应于 λ_2 的特征向量

$$x_2 = x_9 - 2x_8 \doteq (-337,\ -467,\ -1092)^T$$

将 x_2 标准化为

$$x_2' \doteq (0.3086,\ 0.4276,\ 1)^T$$

3 证明 因为

$$\varphi(\lambda) = |\lambda I - A| = \begin{vmatrix} \lambda - a_{11} & -a_{12} & \cdots & -a_{1n} \\ -a_{21} & \lambda - a_{22} & \cdots & -a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ -a_{n1} & -a_{n2} & \cdots & \lambda - a_{nn} \end{vmatrix}$$

$$= \lambda^n - p_1\lambda^{n-1} + \cdots + (-1)^n p_n$$

根据特征多项式的系数和元素的关系式知

$$p_1 = a_{11} + a_{22} + \cdots + a_{nn}$$

$$\cdots\cdots$$

$$P_n = (-1)^n |A|$$

又因为

$$\varphi(\lambda_i) = |\lambda_i I - A| = 0,\quad i = 0, 1, \cdots, n$$

根据韦达定理知

$$P_1 = \lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_n$$

所以

$$P_1 = \sum_{k=1}^{n} \lambda_k = \sum_{k=1}^{n} a_{kk} = Sp A$$

又因为

$$Ax = \lambda x$$

故

$$A^k x = A^{k-1}(Ax) = \cdots = \lambda^k x$$

所以

$$Sp A^k = \lambda_1^k + \lambda_2^k + \cdots + \lambda_n^k$$

$$= \lambda_1^k \left[1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^k + \cdots + \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^k\right]$$

$$\doteq \lambda_1^k \quad \left(k \to \infty, \ \left|\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right| < 1\right)$$

所以

$$\lambda_1 = \lim_{k\to\infty} \sqrt[k]{SpA^k} \quad \text{证完.}$$

4　证明　因为 $y_{k+1} = Ay_k + f$ 收敛于方程组的解 y^*，即当 k 充分大时，有

$$y^* = y_{k+1} \doteq A(y^* - y_k)$$

又由（11.5）当 k 充分大时，有

$$y^* - y_{k+1} \doteq A(y^* - y_k) \doteq \lambda_1(y^* - y_k)$$

所以

$$y^* - y_{k+1} \doteq \lambda_1 y^* - \lambda_1 y_k$$

移项　$(1-\lambda_1)y^* \doteq y_{k+1} - \lambda_1 y_k$，两边除以 $1-\lambda_1$，得

$$y^* \doteq \frac{y_{k+1} - \lambda_1 y_k}{1-\lambda_1} = \frac{(y_{k+1} - y_k) + (y_k - \lambda_1 y_k)}{1-\lambda_1}$$

$$= \frac{(1-\lambda_1)y_k + (y_{k+1} - y_k)}{1-\lambda_1} = y_k + \frac{y_{k+1} - y_k}{1-\lambda_1}$$

即

$$y^* \doteq y_k + \frac{y_{k+1} - y_k}{1-\lambda_1}$$

这是一种对线性方程组的简单迭代法的一种加快敛速法。证完。

5　证明　因为

$$|\lambda I - A| = \begin{vmatrix} \lambda - a_1 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -a_2 & \lambda & -1 & \cdots & 0 \\ -a_3 & 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & -1 \\ -a_n & 0 & \cdots & \cdots & \lambda \end{vmatrix} \quad \text{（按第一行展开）}$$

$$= (\lambda - a_1)\begin{vmatrix} \lambda & -1 & & 0 \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & -1 \\ 0 & & & \lambda \end{vmatrix} +$$

$$+(-1)^{1+2}(-1)\begin{vmatrix} -a_2 & -1 & & 0 \\ -a_3 & \lambda & \ddots & \\ \vdots & 0 & \ddots & -1 \\ -a_n & & & \lambda \end{vmatrix},$$

$$=\lambda^{n-1}(\lambda-a_1)+\begin{vmatrix} -a_2 & -1 & 0 & \\ \vdots & \lambda & \ddots & \\ \vdots & & \ddots & -1 \\ -a_n & 0 & & \lambda \end{vmatrix}$$

（后一项按行展开）

$$=\lambda^n-a_1\lambda^{n-1}+(-a_2)\begin{vmatrix} \lambda & -1 & & 0 \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & -1 \\ 0 & & & \lambda \end{vmatrix}+$$

$$+(-1)^{1+2}(-1)\begin{vmatrix} -a_3 & -1 & & 0 \\ \vdots & \lambda & \ddots & \\ & & \ddots & -1 \\ -a_n & 0 & & \lambda \end{vmatrix}$$

$$=\lambda^n-a_1\lambda^{n-1}-a_2\lambda^{n-2}+\begin{vmatrix} -a_3 & -1 & & & 0 \\ \vdots & \lambda & \ddots & & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \\ & 0 & & \ddots & -1 \\ -a_n & & & & \lambda \end{vmatrix}$$

$$=\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$=\lambda^n-a_1\lambda^{n-1}-a_2\lambda^{n-2}-\cdots-a_{n-1}\lambda-a_n$$

$$=\varphi(\lambda)$$

即A的特征多项式为$\varphi(\lambda)$。

其次，对迭代程序

$$x_{k+1}=Ax_k$$

设

$$x_k=(x_1^{(k)},x_2^{(k)},\cdots x_n^{(k)})^T$$

则

$$
A\boldsymbol{x}_k = \begin{pmatrix} a_1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ a_2 & 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 0 \\ & & & \ddots & 1 \\ a_n & & \cdots & & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \\ \vdots \\ x_n^{(k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 x_1^{(k)} + x_2^{(k)} \\ a_2 x_1^{(k)} + x_3^{(k)} \\ \vdots \\ a_i x_1^{(k)} + x_{i+1}^{(k)} \\ \vdots \\ a_n x_1^{(k)} \end{pmatrix}
$$

故

$$
\boldsymbol{x}_{k+1} = A\boldsymbol{x}_k = (x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \cdots, x_n^{(k+1)})^T
$$

其中

$$
x_i^{(k+1)} = a_i x_1^{(k)} + x_{i+1}^{(k)}, \quad i = 1, 2, \cdots, n-1
$$

$$
x_n^{(k+1)} = a_n x_1^{(k)}
$$

由假定阵A满足幂方法第Ⅰ种要求，故当 $x_i^{(k)} \neq 0$时，可求出A之按模最大特征值

$$
\lambda_1 = \frac{x_i^{(k+1)}}{x_i^{(k)}}
$$

这是一个求代数方程模最大实根的方法。证完。

6 **证明** 由高等代数知识知 A^T 与 A 的特征多项式相同。设其特征根为

$$
\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n
$$

A之对应特征向量为

$$
\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \cdots, \boldsymbol{e}_n
$$

A^T 之对应特征向量为

$$
\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_n
$$

因为A的初等因子为一次的，故其特征向量线性无关，构成向量空间的基底，且

$$
(\boldsymbol{e}_i, \boldsymbol{u}_j) = 0 \quad (i \neq j)
$$

所以设

$$
\boldsymbol{x}_k = \alpha_1\lambda_1^k \boldsymbol{e}_1 + \alpha_2\lambda_2^k \boldsymbol{e}_2 + \cdots + \alpha_n\lambda_n^k \boldsymbol{e}_n
$$

$$
\boldsymbol{y}_k = \beta_1\lambda_1^k \boldsymbol{u}_1 + \beta_2\lambda_2^k \boldsymbol{u}_2 + \cdots + \beta_n\lambda_n^k \boldsymbol{u}_n
$$

$$
\boldsymbol{y}_{k-1} = \beta_1\lambda_1^{k-1} \boldsymbol{u}_1 + \beta_2\lambda_2^{k-1} \boldsymbol{u}_2 + \cdots + \beta_n\lambda_n^{k-1} \boldsymbol{u}_n
$$

则

$$(x_k, y_k) = \alpha_1\beta_1\lambda_1^{2k}(e_1, u_1) + \alpha_2\beta_2\lambda_2^{2k}(e_2, u_2) + \\ + \cdots\cdots + \\ + \alpha_n\beta_n\lambda_n^{2k}(e_n, u_n)$$

$$(x_k, y_{k-1}) = \alpha_1\beta_1\lambda_1^{2k-1}(e_1, u_1) + \alpha_2\beta_2\lambda_2^{2k-1}(e_2, u_2) + \\ + \cdots\cdots + \\ + \alpha_n\beta_n\lambda_n^{2k-1}(e_n, u_n)$$

由于A满足于条件 I，即

$$|\lambda_1| > |\lambda_i|,\quad i \neq 1$$

所以当 k 充分大时，有

$$\frac{1}{\lambda_1^{2k}}(x_k, y_k) = \alpha_1\beta_1(e_1, u_1) + \alpha_2\beta_2\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{2k}(e_2, u_2) + \cdots + \\ + \alpha_n\beta_n\left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^{2k}(e_n, u_n) \\ \doteq \alpha_1\beta_1(e_1, u_1)$$

所以

$$(x_k, y_k) \doteq \lambda_1^{2k}\alpha_1\beta_1(e_1, u_1)$$

同理可证

$$(x_k, y_{k-1}) \doteq \lambda_1^{2k-1}\alpha_1\beta_1(e_1, u_1)$$

从而得

$$\lambda_1 \doteq \frac{(x_k, y_k)}{(x_k, y_{k-1})}$$ 证完。

这是对非对称矩阵求模最大特征值的一种加快法。

习　题　3·12

1　解　设　$y = (C_1, 0, 0, 0)^T$。$\|y\| = \|x\|$

则

$$\sigma_1 = \sqrt{1^2 + 2^2 + 3^2 + (\sqrt{2})^2} = \sqrt{16} = 4$$

$$x - y = (a_{11} + Sng(a_{11})\sigma_1,\ a_{12}, a_{13}, a_{14})^T$$

$$=(1+4, 2, 3, \sqrt{2})^T$$

$$\|x-y\|_2=\sqrt{2(\sigma_1^2+|a_{11}|\sigma_1)}=\sqrt{2(16+1\times 4)}$$

$$=2\sqrt{10}$$

由公式(12,10)

$$u=\frac{x-y}{\|x-y\|}=\frac{1}{2\sqrt{10}}(5, 2, 3, \sqrt{2})^T$$

$$H=I-2uu^T=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}-\frac{2}{40}\begin{pmatrix}5\\2\\3\\\sqrt{2}\end{pmatrix}(5, 2, 3, \sqrt{2})$$

$$=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}-\frac{1}{20}\begin{pmatrix}25&10&15&5\sqrt{2}\\10&4&6&2\sqrt{2}\\15&6&9&3\sqrt{2}\\5\sqrt{2}&2\sqrt{2}&3\sqrt{2}&2\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}0.25&-0.5&-0.75&-0.354\\-0.5&0.8&-0.3&-0.141\\-0.75&-0.3&0.55&-0.212\\-0.354&-0.141&-0.212&0.9\end{pmatrix}$$

可以验证

$$Hx=y$$

2　解　设

$$P_4(\lambda)=\begin{vmatrix}-2-\lambda&1&&0\\1&-2-\lambda&1&\\&1&-2-\lambda&1\\0&&1&-2-\lambda\end{vmatrix}$$

$$(n=0, 1, 2, 3, 4,)$$

阵 A 的施特姆序列为

$$P_0(\lambda)=1$$

$$P_1(\lambda)=-2-\lambda$$

$$P_2(\lambda)=(-2-\lambda)^2-1=\lambda^2+4\lambda+3$$

$$\begin{aligned}P_3(\lambda)&=(-2-\lambda)(\lambda^2+4\lambda+3)-(-2-\lambda)\\&=(-2-\lambda)(\lambda^2+4\lambda+2)\\&=-\lambda^3-6\lambda^2-10\lambda-4\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}P_4(\lambda)&=(-2-\lambda)(-\lambda^3-6\lambda^2-10\lambda-4)-(\lambda^2+4\lambda+3)\\&=\lambda^4+8\lambda^3+21\lambda^2+20\lambda+5\end{aligned}$$

计算斯特姆序列在 $(-\infty,\ 0)$ 内的同号个数

$$S(0)=0,\quad S(-\infty)=4$$

即 $$S(-\infty)-S(0)=4$$

所以$P_4(\lambda)$在左半轴有 4 个根，即A的特征值皆在左半轴，故A为负定的。

3 解 设

$$A_1=A=\begin{pmatrix}2 & b_1^T\\ b_1 & B_1\end{pmatrix}$$

$$b_1=(-1,\ -1)^T$$

选取 $H_1=I-2u_1u_1^T$，$\|u_1\|=1$。使

$$A_2=H_1A_1H=\begin{pmatrix}2 & b_2^T\\ b_2 & B_2\end{pmatrix}$$

$$b_2=(C_1,0)^T,\quad \|b_1\|=\|b_2\|$$

其中C_1为待定常数，则

$$\sigma_1=\sqrt{(-1)^2+(-1)^2}=\sqrt{2}$$

$$\begin{aligned}b_1-b_2&=(a_{21}+\mathrm{Sng}(a_{21})\sigma_1,\ a_{31})^T\\&=(-1-\sqrt{2},\ -1)^T=(-2.41,\ -1)^T\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\|b_1-b_2\|_2&=\sqrt{2(2+(-1)\cdot(-\sqrt{2}))}\\&=\sqrt{4+2\sqrt{2}}\doteq 2.613\end{aligned}$$

由公式(12,10)

$$V_1 = \frac{b_1 - b_2}{\|b_1 - b_2\|_2} = \frac{1}{2.613}(-2.41, -1)^T$$

$$= (-0.922, -0.383)^T$$

$$U_1 = I - 2V_1 V_1^T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - 2\begin{pmatrix} -0.922 \\ -0.383 \end{pmatrix} \times$$

$$\times (-0.922, -0.383)$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - 2\begin{pmatrix} 0.85 & 0.353 \\ 0.353 & 0.147 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} -0.7 & -0.706 \\ -0.706 & 0.706 \end{pmatrix}$$

$$H_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -0.7 & -0.706 \\ 0 & -0.706 & 0.706 \end{pmatrix}$$

$$A_2 = H_1 A_1 H_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -0.7 & -0.706 \\ 0 & -0.706 & 0.706 \end{pmatrix} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -0.7 & -0.706 \\ 0 & -0.706 & 0.706 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ 1.406 & -1.4 & -0.706 \\ 0 & -1.412 & 0.706 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -0.7 & -0.706 \\ 0 & -0.706 & 0.706 \end{pmatrix}$$

$$\doteq\begin{pmatrix} 2 & 1.406 & 0 \\ 1.406 & 1.478 & 0.49 \\ 0 & 0.49 & 1.495 \end{pmatrix}$$

4※ 证明　在定理 3 的证明中，已设

$$A_i=\left(\begin{array}{c:c} D_i & \begin{array}{c} 0 \\ \hdashline b_i^T \end{array} \\ \hdashline \begin{array}{c:c} 0 & b_i \end{array} & B_i \end{array}\right)$$

其中　D_i为 i 阶三对角方块，B_i为$n-i$阶方块. 所以

$$A_i-\lambda I=\left(\begin{array}{c:c} D_i-\lambda I_i & \begin{array}{c} 0 \\ \hdashline b_i^T \end{array} \\ \hdashline \begin{array}{c:c} 0 & b_i \end{array} & B_i-\lambda I_{n-i} \end{array}\right)$$

其中　I_i为 i 阶单位阵. 由(12.12)

$$H_i=\begin{pmatrix} I_i & 0 \\ 0 & U_i \end{pmatrix}$$

则

$$A_{i+1}=H_iA_iH_i=\left(\begin{array}{c:c} D_i & \begin{array}{c} 0 \\ \hdashline b_i^TU_i \end{array} \\ \hdashline \begin{array}{c:c} 0 & U_ib_i \end{array} & U_iB_iU_i \end{array}\right)$$

故

$$A_{i+1}-\lambda I=H_i(A_i-\lambda I)H_i=$$

$$=\left(\begin{array}{c:c} D_i-\lambda I_i & \begin{array}{c} 0 \\ \hdashline b_i^TU_i \end{array} \\ \hdashline \begin{array}{c:c} 0 & b_iU_i \end{array} & U_i(B_i-\lambda I_{n-i})U_i \end{array}\right)$$

只说明 $A_i-\lambda I_i$ 的 i 阶主子式$|D_i-\lambda I_i|$与$A_{i+1}-\lambda I$的 i 阶主子式相同，而$A_i-\lambda I$的 $i+1$ 阶主子式不一定与 $A_{i+1}-\lambda I$ 的 $i+1$ 阶主子式相同. 从而可知，在定理 3 中所作变换下A

与 A_i 不一定有相同的斯特姆序列。证完。

5 证明 用反证法。假设阵 A 的某个特征值 $\bar{\lambda}$ 不满足不等式

$$|\lambda - a_{ii}| \leqslant R_i, \quad i = 1, 2, \cdots, n$$

中的任何一个，即

$$|\bar{\lambda} - a_{ii}| > R_i, \quad i = 1, 2, \cdots, n$$

其中

$$R_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} |a_{ij}|$$

今考虑矩阵

$$(\bar{\lambda} I - A) = \begin{pmatrix} \bar{\lambda} - a_{11} & -a_{12} \cdots & -a_{1n} \\ -a_{21} & \bar{\lambda} - a_{22} \cdots & -a_{2n} \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ -a_{n1} & -a_{n2} \cdots & \bar{\lambda} - a_{nn} \end{pmatrix}$$

由上式可知，此阵为强对角占优，由§6定理1知，$\bar{\lambda} I - A$ 可逆，即它的行列式非零，这与 $\bar{\lambda}$ 为 A 的特征值矛盾，故命题结论成立。

由命题可知，A 的特征值都在以 a_{ii} 为中心，以 R_i 为半径的圆的并集内。

6 证明 由题设 x 为 B 的特征向量，则 $Bx = \lambda x$，λ 为 B 的特征根

若证 $y = Hx$ 是 A 的特征向量，只须证

$$Ay = \lambda y$$

即可，因为

$$\begin{aligned} Ay &= HBH^{-1}Hx = HBx \\ &= H\lambda x = \lambda Hx = \lambda y, \end{aligned}$$ 证完。

注意，定理3并没给出与已知特征值 λ 相应的特征向量的计算问题，此题回答了这个问题。

习　题　3·13

1　解　令

$$x_1=\begin{pmatrix}12\\9\\20\end{pmatrix},\quad x_2=\begin{pmatrix}-20\\-15\\50\end{pmatrix},\quad x_3=\begin{pmatrix}41\\-63\\35\end{pmatrix}$$

首先将向量组x_1, x_2, x_3正交化，然后单位化。令

$$u_1=x_1=(12,\ 9\ ,\ 20)^T \tag{1}$$

$$u_2=x_2+k_1u_1$$

选择k_1，使$(u_1, u_2)=0$，则

$$k_1=\frac{-(u_1, x_2)}{(u_1, u_1)}=-1$$

所以

$$u_2=x_2-x_1=(-32,\ -24,\ 30)^T \tag{2}$$

再令

$$u_3=x_3+k_2u_2+k_1u_1$$

选择 k_1, k_2使$(u_1, u_3)=0$，$(u_2, u_3)=0$，则

$$k_1=-\frac{(u_1, x_3)}{(u_1, u_1)}=-1,\ k_2=-\frac{(u_2, x_3)}{(u_2, u_2)}=-\frac{1}{2}$$

得

$$u_3=x_3-\frac{1}{2}u_2-u_1$$

$$=\begin{pmatrix}41\\-63\\35\end{pmatrix}-\frac{1}{2}\begin{pmatrix}-32\\-24\\30\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}12\\6\\20\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}45\\-60\\0\end{pmatrix} \tag{3}$$

由(1),(2),(3)知

$$\begin{cases} x_1 = u_1 \\ x_2 = u_1 + u_2 \\ x_3 = u_1 + \dfrac{1}{2}u_2 + u_3 \end{cases} \quad \text{或} \quad \begin{cases} u_1 = x_1 \\ u_2 = -x_1 + x_2 \\ u_3 = -\dfrac{1}{2}x_1 - \dfrac{1}{2}x_2 + x_3 \end{cases}$$

用矩阵表示则有

$$(x_1, x_2, x_3) = (u_1, u_2, u_3)\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & \dfrac{1}{2} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

或

$$(u_1, u_2, u_3) = (x_1, x_2, x_3)\begin{pmatrix} 1 & -1 & -\dfrac{1}{2} \\ 0 & 1 & -\dfrac{1}{2} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

将 u_1, u_2, u_3 单位 化：因为

$$\|u_1\|_2 = 25, \quad \|u_2\|_2 = 50, \quad \|u_3\|_2 = 75$$

则

$$A_1 = [x_1, x_2, x_3] = [u_1, u_2, u_3]\begin{pmatrix} \dfrac{1}{25} & 0 & 0 \\ 0 & \dfrac{1}{50} & 0 \\ 0 & 0 & \dfrac{1}{75} \end{pmatrix} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} 25 & 0 & 0 \\ 0 & 50 & 0 \\ 0 & 0 & 75 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & \dfrac{1}{2} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \dfrac{u_1}{25}, & \dfrac{u_2}{50}, & \dfrac{u_3}{75} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 25 & 25 & 25 \\ 0 & 50 & 25 \\ 0 & 0 & 75 \end{pmatrix}$$

所以

$$A_1=(x_1, x_2, x_3)$$

$$Q=\left(\frac{u_1}{25}, \frac{u_2}{50}, \frac{u_3}{75}\right)=\begin{pmatrix} \frac{12}{25} & -\frac{16}{25} & \frac{3}{5} \\ \frac{9}{25} & -\frac{12}{25} & -\frac{4}{5} \\ \frac{4}{5} & \frac{3}{5} & 0 \end{pmatrix}$$

$$R=\begin{pmatrix} 25 & 25 & 25 \\ 0 & 50 & 25 \\ 0 & 0 & 75 \end{pmatrix}$$

$$A_1=QR$$

$$A_2=R\,Q=\begin{pmatrix} 25 & 25 & 25 \\ 0 & 50 & 25 \\ 0 & 0 & 75 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 12/25 & -16/25 & 3/5 \\ 9/25 & -12/25 & -4/5 \\ 4/5 & 3/5 & 0 \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} 41 & -13 & -5 \\ 38 & -9 & -40 \\ 60 & 45 & 0 \end{pmatrix}$$

2　解　令

$$x_1=(-2,1,0,0)^T,\quad x_2=(1,-2,1,0)^T$$

$$x_3=(0,1,-2,1)^T,\quad x_4=(0,0,1,-2)^T$$

将此向量组正交化及单位化．令

$$u_1=x_1=(-2,1,0,0)^T \tag{1}$$

$$u_2=x_2+k_1u_1$$

选择 k_1 使 $(u_1, u_2)=0$，则得

$$k_1=-\frac{(u_1, x_2)}{(u_1, u_1)}=-\frac{-4}{5}=\frac{4}{5}$$

所以

$$u_2 = x_2 + \frac{4}{5}x_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{4}{5}\begin{pmatrix} -2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{3}{5} \\ -\frac{6}{5} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad (2)$$

令 $\quad u_3 = x_3 + k_2 u_2 + k_1 u_1$

选择 k_1, k_2 使 $(u_1, u_3) = 0$, $(u_2, u_3) = 0$,则得

$$k_1 = -\frac{(u_1, x_3)}{(u_1, u_1)} = -\frac{1}{5}$$

$$k_2 = -\frac{(u_2, x_3)}{(u_2, u_2)} = -\frac{-16/5}{14/5} = \frac{8}{7}$$

所以

$$u_3 = x_3 + \frac{8}{7}u_2 - \frac{1}{5}u_1$$

$$= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{8}{7}\begin{pmatrix} -\frac{3}{5} \\ -\frac{6}{5} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{5}\begin{pmatrix} -2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$= \left(-\frac{2}{7}, \ -\frac{4}{7}, \ -\frac{6}{7}, \ 1\right)^T \qquad (3)$$

$$u_4 = x_4 + k_3 u_3 + k_2 u_2 + k_1 u_1$$

选择 k_1, k_2, k_3 使

$$(u_1, u_4) = 0, \quad (u_2, u_4) = 0, \quad (u_3, u_4) = 0$$

则得

$$k_1 = -\frac{(u_1, x_4)}{(u_1, u_1)} = -\frac{0}{5} = 0$$

$$k_2 = -\frac{(u_2, x_4)}{(u_2, u_2)} = -\frac{1}{14/5} = -\frac{5}{14}$$

$$k_3 = -\frac{(\boldsymbol{u}_3, \boldsymbol{x}_4)}{(\boldsymbol{u}_3, \boldsymbol{u}_3)} = -\frac{-20/7}{105/49} = \frac{140}{105} = \frac{4}{3}$$

所以

$$\boldsymbol{u}_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -2 \end{pmatrix} + \frac{4}{3}\begin{pmatrix} -\frac{2}{7} \\ -\frac{4}{7} \\ -\frac{6}{7} \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{5}{14}\begin{pmatrix} -\frac{3}{5} \\ -\frac{6}{5} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{6} \\ -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{2} \\ -\frac{2}{3} \end{pmatrix} \qquad (4)$$

由(1),(2),(3),(4)知

$$\boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{u}_1$$

$$\boldsymbol{x}_2 = -\frac{4}{5}\boldsymbol{u}_1 + \boldsymbol{u}_2$$

$$\boldsymbol{x}_3 = \frac{1}{5}\boldsymbol{u}_1 - \frac{8}{7}\boldsymbol{u}_2 + \boldsymbol{u}_3$$

$$\boldsymbol{x}_4 = 0\boldsymbol{u}_1 + \frac{5}{14}\boldsymbol{u}_2 - \frac{4}{3}\boldsymbol{u}_3 + \boldsymbol{u}_4$$

用矩阵表示，则有

$$(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_3, \boldsymbol{x}_4) = (\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_3, \boldsymbol{u}_4)\begin{pmatrix} 1 & -\frac{4}{5} & \frac{1}{5} & 0 \\ & 1 & -\frac{8}{7} & \frac{5}{14} \\ 0 & & 1 & -\frac{4}{3} \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

将 $\boldsymbol{u}_1$、$\boldsymbol{u}_2$、$\boldsymbol{u}_3$、$\boldsymbol{u}_4$ 单位化。因 $\|\boldsymbol{u}_1\|_2 = \sqrt{5}$，$\|\boldsymbol{u}_2\|_2 = \sqrt{70}$，$\|\boldsymbol{u}_3\|_2 = \sqrt{105}$，$\|\boldsymbol{u}_4\|_2 = \sqrt{30}$ 从而可知

$$A = (\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_3, \boldsymbol{x}_4)$$

$$Q = \left(\frac{\boldsymbol{u}_1}{\|\boldsymbol{u}_1\|_2}, \frac{\boldsymbol{u}_2}{\|\boldsymbol{u}_2\|_2}, \frac{\boldsymbol{u}_3}{\|\boldsymbol{u}_3\|_2}, \frac{\boldsymbol{u}_4}{\|\boldsymbol{u}_4\|_2} \right)$$

$$
=\begin{pmatrix}
-\frac{2}{\sqrt{5}} & -\frac{3}{5\sqrt{70}} & -\frac{2}{7\sqrt{105}} & -\frac{1}{6\sqrt{30}} \\
\frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{6}{5\sqrt{70}} & -\frac{4}{7\sqrt{105}} & -\frac{1}{6\sqrt{30}} \\
0 & \frac{1}{\sqrt{70}} & -\frac{6}{7\sqrt{105}} & -\frac{3}{6\sqrt{30}} \\
0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{105}} & -\frac{4}{6\sqrt{30}}
\end{pmatrix}
$$

$$
R=\begin{pmatrix}
\|u_1\|_2 & -\frac{4}{5}\|u_1\|_2 & \frac{1}{5}\|u_1\|_2 & 0 \\
0 & \|u_2\|_2 & -\frac{8}{7}\|u_2\|_2 & \frac{5}{14}\|u_2\|_2 \\
0 & 0 & \|u_3\|_2 & -\frac{4}{3}\|u_3\|_2 \\
0 & 0 & 0 & \|u_4\|_2
\end{pmatrix}
$$

$$
=\begin{pmatrix}
\sqrt{5} & -\frac{4}{5}\sqrt{5} & \frac{1}{5}\sqrt{5} & 0 \\
0 & \sqrt{70} & -\frac{8}{7}\sqrt{70} & \frac{5}{14}\sqrt{70} \\
0 & 0 & \sqrt{105} & -\frac{4}{3}\sqrt{105} \\
0 & 0 & 0 & \sqrt{30}
\end{pmatrix}
$$

所以

$$A=QR$$

3 证明 设 $R_k\to R_0(k\to\infty)$，则由题设知

$L_k\to R_0^{-1}\quad(k\to\infty)$。

下面去证明

$$R_0^{-1}=I$$

由于 $R_k\to R_0$，知 R_0是上三角阵，其逆 R_0^{-1}也为上三角阵，所以由 $L_k\to R_0^{-1}$ 知当 $i>j$ 时，

$$l_{ij}^{(k)}\to 0\quad(k\to\infty)$$

其中 $L_k=(l_{ij})$，当 $i<j$ 时，$l_{ij}^{(k)}=0$，L_k 的对角元$=1$。所以

$L_k \to I$（单位阵），即 R_0^{-1} 为单位阵 I。从而 R_0 也是单位阵。证完。

4 证明 设 $\overline{L}_k = L_1 L_2 \cdots L_k$，$\overline{R}_k = R_k R_{k-1} \cdots R_1$。

因为

$$A_{k+1} = R_k L_k, \quad A_k = L_k R_k$$

所以

$$A_{k+1} = L_k^{-1} A_k L_k$$
$$L_k A_{k+1} = A_k L_k$$

又因

$$\begin{aligned}\overline{L}_k \overline{R}_k &= L_1 \cdots L_k R_k \cdots R_2 R_1 \\ &= L_1 \cdots L_{k-1} A_k R_{k-1} \cdots R_1 \\ &= L_1 \cdots L_{k-2} A_{k-1} L_{k-1} R_{k-1} \cdots R_1 \\ &\cdots\cdots \\ &= A_1 L_1 \cdots L_{k-1} R_{k-1} \cdots R_1 \\ &= A_1 \overline{L}_{k-1} \overline{R}_{k-1}\end{aligned}$$

由上面递推公式可得

$$\begin{aligned}\overline{L}_k \overline{R}_k &= A_1^2 \overline{L}_{k-2} \overline{R}_{k-2} \\ &\cdots\cdots \\ &= A_1^{k-1} \overline{L}_1 \overline{R}_1 \\ &= A_1^k\end{aligned}$$

所以

$$L_1 \cdots L_k R_k \cdots R_2 R_1 = A_1^k$$

其次，因

$$L_k A_{k+1} = A_k L_k$$

所以

$$\begin{aligned}(L_1 \cdots L_k) A_{k+1} &= L_1 \cdots L_{k-1} A_k L_k \\ & L_1 \cdots L_{k-2} A_{k-1} L_{k-1} L_k \\ &\cdots\cdots \\ &= A_1 (L_1 L_2 \cdots L_k)\end{aligned}$$

所以

$$A_{k+1}=(L_1L_2\cdots L_k)^{-1}A_1\ (L_1\cdots L_k)$$ 证完

注意，这也是一种求特征值的方法，叫做LR方法。

5　证明　设非奇异阵

$$A=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12}\cdots a_{1n} \\ a_{21} & a_{22}\cdots a_{2n} \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ a_{n1} & a_{n2}\cdots a_{nn} \end{pmatrix}$$

a_i 为A的第 i 列向量，可用§3.12中所介绍的初等反射矩阵来将A化为上三角阵。如可作初等反射阵H_1使a_1变为 $r_1=(r_{11},0,\cdots,0)^T$。

$$H_1A=[r_1,H_1a_2,\cdots H_1a_n]$$

然后作初等反射阵 H_2，使向量 H_1a_2化为

$$r_2=(r_{12},r_{22},\ 0\ ,\cdots,\ 0\ )^T$$

而使　r_1不变，此时

$$H_2H_1A=[r_1,r_2,H_2H_1a_3,\cdots,H_2H_1a_n]$$

依此作下去，到第$n-1$次作H_{n-1}使$H_{n-2}\cdots H_1A$的第$n-1$列为

$$r_{n-1}=(r_{1,n-1},\cdots r_{n-1,n-1},\quad 0\ )^T$$

于是

$$H_{n-2}\cdots H_1A=[r_1,r_2,\cdots,r_{n-1},r_n]$$（上三角阵）。

令

$$Q^{-1}=H_{n-2}\cdots H_1,\quad R=[r_1,r_2,\cdots,r_n]$$

则

$$Q^{-1}A=R$$

所以

$$A=QR$$ 证完。

第四章　插值与逼近习题解答

习　　题　4·3

1　解　因为 $x_0=3$，$y(3)=0.5$，$x_1=4$，$f(4)=0.64$，$x=3.8$. 代入（2.1）式得

$$y(3.8)=0.5+\frac{0.64-0.5}{4-3}(3.8-3)=0.612$$

即　$f(3.8)\doteq 0.61$.（或者用（2.2）求之.）

2　解　此题应用（2.5），与§2例2完全一样的做法，得

$$L_2(x)=x+1$$

此题说明三个互不相同的节点，所求的插值多项式，不一定是二次的，而可以是低于二次的多项式.

3　解　设 $x_0=100$，$x_1=121$，$x_2=144$，$x=115$，代入（2.5）得

$$L_2(115)=\frac{(115-121)\quad(115-144)}{(100-121)\quad(100-144)}\times 10$$

$$+\frac{(115-100)\quad(115-144)}{(121-100)\quad(121-144)}\times 11$$

$$+\frac{(115-100)\quad(115-121)}{(144-100)\quad(144-121)}\times 12$$

$$=1.883+9.907-1.067\doteq 10.723$$

即　$\sqrt{115}\doteq 10.72$

4　解　先将“四位数字用表”中正弦和余弦表，摘抄如下：

正　弦

A	0′	6′	12′	18′……54′	60′		1′	2′	3′
0°	0.0000					90°			
⋮						⋮			
10°	0.1736		1771	1788		79°	3	6	9
11°						78°			
⋮						⋮			
34°						55°			
	60′	54′	48′	42′ … 6′	0′	A	1′	2′	3′

余　弦

熟知用此表可以查出从0°到90°，每差1′的各角的正弦值和余弦值．但正表中，只能查出从0°到90°，每差6′的各角正弦和余弦值。为获得相差1′的值，必须从修正栏中，找其相应的值，才能实现上述目的．

下面结合此函数来说明修正栏的构造道理．

如果把正表中角的度数，记为x_0，则用x表示任意一个不能被6′整除的角的度数，记作

$$x=x_0\pm t',\ t'=1',\ 2',\ 3',\ 0<x<90$$

相应地，把x_1记作$x_1=x_0\pm 6'$。于是，由线性插值公式(2.1)，得

$$\sin(x)=\sin(x_0\pm t')\doteq\sin x_0\pm\frac{t'}{6'}\Delta y_0$$

其中　$\Delta y_0=\sin x_1-\sin x_0$。或改写成

$$\sin(x_0\pm t')\doteq\sin x_0\pm S_{x_0,t}\times 10^{-4}$$

其中 $S_{x_0,t'}=\frac{t'}{6'}|\Delta y_0|$，它是表示修正项的整数值，是由$x_0$，$t'$来确定的。

因此，修正值栏是为计算$S_{x_0,t'}$之值，按x_0行与t'列的排列构成的。即修正值栏是由线性插值构成的。

例如求sin10°14′时，先查出 sin10°12′ = 0.1771，再查出对应的修正栏值为 6，然后计算得

$$\sin 10°14' = 0.1771 + 6\times 10^{-4} = 0.1777$$

其中修正栏值 6 是由

$$S_{10°12',2'} = \frac{2'}{6'}\times 0.0017\times 10^4 \doteq 6$$

计算的。

又因为 $\cos\alpha = \sin(90° - \alpha)$，故可用此表求相应余弦值，不必另造修正栏。

5 设 $x_0 = 0$，$x_1 = \frac{\pi}{2}$，$x_2 = \pi$，按（2.5）作其抛物插值多项式。

$$L_2(x) = \frac{(x-0)(x-\pi)}{\left(\frac{\pi}{2}-0\right)\left(\frac{\pi}{2}-\pi\right)}\times 1 = -\left(\frac{2}{\pi}\right)^2 x(x-\pi)$$

于是将 $\sin x$、$L_2(x)$、x、$x-\frac{x^3}{6}$的函数值列表如下：

x	0	0.5	1	$\sqrt{2}$	$\frac{\pi}{2}$	2	2.5	π
$\sin x$	0	0.479	0.841	0.988	1	0.909	0.598	0
$L_2(x)$	0	0.535	0.868	0.990	1	0.925	0.650	0
$x-\frac{x^3}{6}$	0	0.479	0.830	0.943	0.920	0.666	-0.614	-2.026

它们的图象分别如图 3。

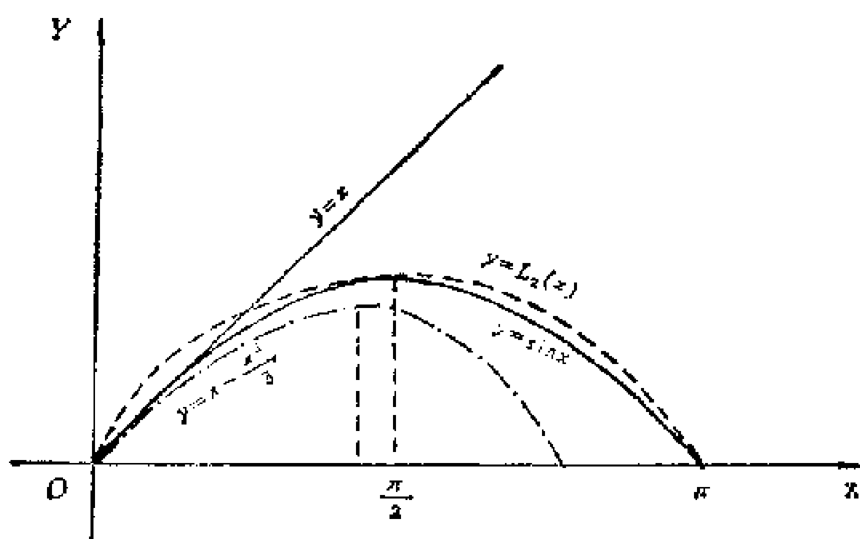


图 3

从函数表与图象中看出，用 $y=x$ 近似$\sin x$，仅在 $x=0$ 的附近时，比较准确，而 $x-\frac{x^3}{6}$ 近似$\sin x$，只有在$x\in[0,\sqrt{2}]$时，近似程度较好，而插值多项式$L_2(x)$在$x\in[0,\pi]$上较均匀地近似$\sin x$，特别是在 0，$\frac{\pi}{2}$，π 处最好。

6　解　令　$x=x_0$，代入 $L_2(x)$，得

$$L_2(x_0)=l_0(x_0)y_0+l_1(x_0)y_1+l_2(x_0)y_2=y_0$$

比较等式两边，得

$$l_0(x_0)=1,\ l_1(x_0)=0,\ l_2(x_0)=0$$

同理，$x=x_1$，x_2 代入 $L_2(x)$，得

$$l_0(x_1)=0,\ l_1(x_1)=1,\ l_2(x_1)=0$$

$$l_0(x_2)=0,\ l_1(x_2)=0,\ l_2(x_2)=1$$

因 $l_0(x)$是二次式，且 $l_0(x_1)=0$，$l_0(x_2)=0$，所以可设

$$l_0(x)=k(x-x_1)(x-x_2)$$

令 $x=x_0$，代入上式，且注意 $l_0(x_0)=1$，得

$$l_0(x_0)=k(x_0-x_1)(x_0-x_2)=1$$

从而

$$k=\frac{1}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}$$

即

$$l_0(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}$$

注意节点与排列顺序无关，同理，可推得

$$l_1(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}$$

$$l_2(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

注：这也是推导拉格朗日插值多项式的一种方法。

7　证明　因为从 $(3.8)_1$ 的拉格朗日插值多项式

$$L_n(x)=\sum_{i=0}^{n}l_i(x)y_i$$

其中

$$l_i(x)=\frac{\omega(x)}{(x-x_i)\omega'(x_i)},$$

$$\omega(x)=(x-x_0)\cdots(x-x_n)$$

可知，每一项由 n 次式 $l_i(x)$乘上y_i组成，而每一项的首项系数为$\frac{y_i}{\omega'(x_i)}$，所以，$L_n(x)$ 的首项系数为

$$\sum_{i=0}^{n}\frac{y_i}{\omega'(x_i)}=f(x_0,x_1,\cdots,x_n)$$

又因为加法满足交换律，所以对 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 的任何一种排列，其首项系数是不变的。因而把不变性，称$f(x_0,x_1,\cdots,x_n)$为关于节点$x_0,x_1,\cdots,x_n$ 是对称的。

8　证明　由拉格朗日插值公式

$$\begin{aligned}f(x)&=L_n(x)+R_n(f,x)\\&=\sum_{i=0}^{n}l_i(x)y_i+\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x)\end{aligned}$$

可知，对任意$f(x)$均可成立（只要 $f(x)$在区间$[a,b]$上有 $n+1$

阶导数存在）. 于是，我们取特殊的$f(x)$，也应该是成立的。设$f(x)\equiv 1$，则 $f^{(n+1)}(x)=0$，代入插值公式得

$$\sum_{i=0}^{n} l_i(x)=1$$

9　证明　设$f(x)$为任意 n 次多项式，则

$$f^{(n+1)}(x)=0$$

从而知

$$R_n(f,x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x)=0$$

因此，

$$f(x)\equiv L_n(x)$$

10　解　设 $x_i=i$，则$y_i=i$，将它们代入(3.8)₁式中，得

$$L_n(x)=\sum_{i=0}^{n} i l_i(x)$$

其中

$$l_i(x)=\prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n}\left(\frac{x-k}{i-k}\right)$$

因已知 $y=x$，又由上题知，$x=L_n(x)$，故

$$x=\sum_{i=0}^{n}\left(\prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n}\left(\frac{x-k}{i-k}\right)\right)\cdot i$$

11　解　把函数表变成反函数表

$p(x)$	-2	-1	1	2
x	-1	0	1	2

因其是严格单调的，故可用反插值求 $p(x)=0$ 的根. 将反函数表值及$y=0$　代入（3.13），计算得

$$\varphi_2(0)=\frac{1}{2}$$

即 $p(x)=0$，在$[-1,2]$上的近似根为0.5。

注：或者把 $p(x_i)$看成节点，把x_i看成函数表，把零看成插值点，按 (3.8)₁求在$p(x)=0$处的函数值，把它作为方程 $p(x)=0$ 的近似根.

12 解 设密度为x万株/公顷，则开花数，结荚数、脱落率为 $y(x)$、$z(x)$、$w(x)$。此时，节点 $x_0=35$万株/公顷，$x_1=30$万株/公顷，插值点$x=32$万株/公顷. 代入 (2.1) 式得

$$y(32)=y(35)+\frac{y(30)-y(35)}{30-35}(32-35)$$

$$=1450.6\doteq 1450$$

同理，按 (2.1) 式可计算出结荚数、脱落率为

$$z(32)\doteq 344,\ \omega(32)=76.02(\%)$$

而由$y(32)$与$z(32)$来计算脱落率，得

$$\frac{1450-344}{1450}\doteq 76.3(\%)$$

从计算结果来看，所算的脱落率其本上相同，但是，从误差积叠的意义上看，从脱落率直接作插值，要比由开花数，结荚数分别作插值，再求其脱落率要准确些，因为前者仅产生一次插值误差，后者产生二次插值误差.

13 解 设$x_i=x_0+ih$，$i=1,2,\cdots,n$，$h>0$，
又设$x=x_0+th$，则$x-x_k=h(t-k)$，$x_i-x_k=h(i-k)$. 于是代入 (3.8)₁得

$$L_n(x)=L_n(x_0+th)=\sum_{i=0}^{n}l_i(x)y_i$$

其中

$$l_i(x_0+th)=\prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n}\left(\frac{t-k}{i-k}\right)$$

注意，$L_n(x)$与$l_i(x)$在等距节点时，仅与 t 有关，为此，引入记号 $L_n(x)=L_n(t)$，$l_i(x)=l_i(t)$. 即等距拉格朗日插值多项式为

$$L_n(t)=\sum_{i=0}^{n} l_i(t)y_i$$

其中

$$l_i(t)=\prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n}\left(\frac{t-k}{i-k}\right)$$

习　　题 4.4

1　证明　因为　$F(x)=cf(x)+dg(x)$，所以 $F(x_i)=cf(x_i)+dg(x_i)$。反复利用习题 4.3 第 7 题，有

$$F(x_0,x_1\cdots,x_n)=\sum_{i=0}^{n}\frac{F(x_i)}{\omega'(x_i)}$$

$$=c\sum_{i=0}^{n}\frac{f(x_i)}{\omega'(x_i)}+d\sum_{i=0}^{n}\frac{g(x_i)}{\omega'(x_i)}$$

$$=cf(x_0,x_1,\cdots,x_n)+dg(x_0,x_1,\cdots,x_n)$$

2　证明　设任意 n 次多项式为

$$f(x)=a_0x^n+a_1x^{n-1}+\cdots+a_n\quad(a_0\neq 0)$$

则

$$f^{(n)}(x)=n!a_0,\ 且\ f^{(n)}(\xi_1)=n!a_0$$

其中ξ_1位于 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 所确定的区间内．利用差商与导数的关系式（4.9），得

$$f(x_0,x_1,\cdots,x_n)=\frac{f^{(n)}(\xi_1)}{n!}=a_0$$

故 n 次多项式的 n 阶差商为常数，而此常数就是 n 次多项式的首项系数．

注　此题也可由习题 4.3 的第 7 、 9 题来论证之。

3　解　从已知函数表知$n=4$，x_i按原表顺序排列．列差商表计算各阶差商，见下表：

i	x_i	y_i	差		商	
			一　阶	二　阶	三　阶	四　阶
0	0	0				
1	1	-7	-7			
2	4	8	5	3		
3	3	5	3	-1	-1.333	
4	6	14	3	0	0.2	0.256

代入（4.3）式，得

$$f_4(x)=-7x+3x(x-1)+(-1.333)x(x-1)(x-4)$$
$$+0.256x(x-1)(x-4)(x-3)$$
$$=0.256x^4-3.377x^3+14.523x^2-18.4$$

注　因参加运算的数取三位小数，故不可避免要产生舍入误差。即　$f_4(1)=-6.998\doteq-7$。

4　解　设x_i按表顺序排列，先造差商表：

i	x_i	y_i	差	商	
			一　阶	二　阶	三　阶
0	21°	0.35837			
1	22°	0.37461	0.01624		
2	24°	0.40674	0.01607	-0.00006	
3	25°	0.42262	0.01588	-0.00006	0.00000

按（4.3）式形式计算 sin23°的近似值，即

$$f_3(23°) \doteq \{(-0.00006)(23-22)+0.01624\} \times$$
$$\times(23-21)+0.35837$$
$$\doteq 0.39073$$

故 $\sin 23° \doteq 0.39073$.

5 解 先造差分表:

i	x_i	y_i	Δy_i	$\Delta^2 y_i$	$\Delta^3 y_i$	$\Delta^4 y_i$
0	0.5	1.6487				
1	0.6	1.8221	0.1734			
2	0.7	2.0138	0.1917	0.0183		
3	0.8	2.2255	0.2117	0.0200	0.0017	
4	0.9	2.4596	0.2341	0.0224	0.0024	0.0007

因 $x=0.55$，在函数表的前边，故我们用牛顿前插多项式计算其近似值．为此，先计算相应的 t 值:

$$t=\frac{x-x_0}{h}=\frac{0.55-0.5}{0.1}=0.5$$

其次，利用 $(4.14)_2$式计算 $f_4(0.55)$之值:

$$f_4(0.55)=\left\{\left[\left(\frac{0.0007}{4!}(0.5-3)+\frac{0.0017}{3!}\right)(0.5-2)+\right.\right.$$
$$\left.\left.+\frac{0.0183}{2!}\right](0.5-1)+0.1734\right\}\times$$
$$\times 0.5+1.6487=1.7332$$

同理，因 $x=0.85$，在函数表后端，故可按牛顿后插多项式计算．先计算 t 值:

$$t=\frac{x-x_4}{h}=\frac{0.85-0.9}{0.1}=-0.5$$

利用 $(4.17)_2$ 计算 $f(0.85)$之值：

$$f(0.85)\doteq f_4(0.85)=\left\{\left[\left(\frac{0.0007}{4!}(3-0.5)+\frac{0.0024}{3!}\right)\times(2-0.5)+\frac{0.0224}{2!}\right]\times(1-0.5)+0.2341\right\}\times(-0.5)+2.4596=2.3396$$

6 **解** 因已知函数表的节点数为5，而抛物插值仅需三个节点，为此要使所求近似值的误差尽量小，即要求

$$|R_2(f,x)|\leqslant\frac{M_3}{3!}|\omega(x)|$$

尽量小。故只要选节点使 $|\omega(x)|$ 为尽量小。显然，最靠近插值点的三个节点，一定满足上述要求。

因为插值点 $x=0.63891$，所以节点为0.5,0.6,0.7比选其它节点组，如（0.6、0.7、0.8）或（0.5、0.7、0.8），所对应的 $|\omega(x)|$ 都要小。因此，其所求插值函数值的绝对误差也为最小的。

为此，先按函数表

x	0.5	0.6	0.7
$\sin x$	0.47943	0.56464	0.64422

令 $x=0.63891$，代入（2.5），计算得

$$\sin(0.63891)\doteq0.59627$$

如果不选上述节点组，而按函数表

x	0.6	0.7	0.8
$\sin x$	0.56464	0.64422	0.71736

令 $x=0.63891$，代入（2.5），计算得

$$\sin(0.63891)\doteq0.59637$$

因为 $\sin(0.63891)=0.5963208\cdots$，所以，有

$$|\sin(0.63891)-0.59627|$$
$$<|\sin(0.63891)-0.59637|$$

即按前一组节点所计算得的函数近似值较准确些. 之所以有此事实，是因为

$$|(x-0.5)(x-0.6)(x-0.7)|$$
$$<|(x-0.6)(x-0.7)(x-0.8)|$$

其中$x=0.63891$。

7 证明

（1） 由差商与导数的关系式（4.9）

$$f(x_0,x_1,\cdots,x_n)=\frac{f^{(n)}(\xi)}{n!} \quad x_0<\xi<x_n$$

及差商与差分的关系式（4.12），得

$$f(x_0,x_1,\cdots,x_n)=\frac{\Delta^n y_0}{n!h^n}$$

立即推得

$$\Delta^n y_0=h^n f^{(n)}(\xi)$$

（2） 由（1）得

$$\frac{\Delta^n y_0}{h^n}=f^{(n)}(\xi)$$

对上式两边取极限，得

$$\lim_{h\to 0}\frac{\Delta^n y_0}{h^n}=\lim_{h\to 0}f^{(n)}(\xi)=f^{(n)}(x_0)$$

8 证明 因已知

$$F(x)=c_1f(x)+c_2g(x)$$

则由习题4.4.第一题知，有

$$F(x_i,x_{i+1},\cdots,x_{i+k})=c_1f(x_i,x_{i+1}\cdots,x_{i+k})$$
$$+c_2g(x_i,x_{i+1},\cdots,x_{i+k})$$

又利用差商与差分的关系，上式变为

$$\frac{\Delta^k F(x_i)}{k!h^k}=c_1\frac{\Delta^k f(x_i)}{k!h^k}+c_2\frac{\Delta^k g(x_i)}{k!h^k}$$

上式两边除以$k!h^k$，得

$$\Delta^k F(x_i)=c_1\Delta^k f(x_i)+c_2\Delta^k g(x_i)$$

9　证明　设确定的x，在x_0的某个邻域内．对（4.13）式

$$f_n(x)=f(x_0)+\frac{\Delta y_0}{h}(x-x_0)+\cdots+$$

$$+\frac{\Delta^n y_0}{n!h^n}(x-x_0)\cdots(x-x_{n-1})$$

取极限，且注意题7（2）的结论，得

$$\lim_{h\to 0}f_n(x)=f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)+\cdots$$

$$+\frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x-x_0)^n$$

其中$h\to 0$，$x_i\to x_0$。

10　证明　由第8题知，只要证 $p(x)=x^n$ 有本题结论就行。

设函数$p(x)$在x上的一阶差分，记为

$$\Delta p(x)=p(x+h)-p(x)\quad (h>0)$$

则当$p(x)=x^n$时，

$$\begin{aligned}\Delta p(x)&=(x+h)^n-x^n\\&=h\left[(x+h)^{n-1}+(x+h)^{n-2}\cdot x+\cdots+x^{n-1}\right]\\&=hf_{n-1}(x)\end{aligned}$$

其中 $f_{n-1}(x)$表示关于x的$n-1$次多项式．因此，n次多项式的一阶差分确实是$n-1$次多项式．

因为 $p^{(n)}(x)=(x^n)^{(n)}=n!$ ，所以，

$$\begin{aligned}\Delta^n p(x)&=h^n p^{(n)}(\xi)\qquad (x<\xi<x+nh)\\&=n!h^n\end{aligned}$$

故n次多项式的n阶差分为常数。

又因为 $p^{(n+1)}(x)=(x^n)^{(n+1)}=0$，所以，

$$\Delta^{n+1}p(x)=0$$

故n次多项式的$n+1$阶差分等于零。

11 证明 （1）用数字归纳法证之。

当 $k=1$ 时，等式（1）显然成立。即

$$\Delta y_i = y_{i+1} - y_i$$

设 $k=n$ 时，等式（1）成立。即

$$\Delta^n y_i = y_{i+n} - c_n^1 y_{i+n-1} + \cdots + (-1)^n y_i$$

那么，我们证实 $k=n+1$时，等式（1）也成立。事实上，

$$\begin{aligned}\Delta^{n+1} y_i &= \Delta^n y_{i+1} - \Delta^n y_i \\ &= y_{i+n+1} - c_n^1 y_{i+n} + \cdots + (-1)^j c_n^j y_{i+n+1-j} \\ &\quad + \cdots + (-1)^n y_{i+1} - [y_{i+n} - c_n^1 y_{i+n-1} + \cdots \\ &\quad + (-1)^{j-1} c_n^{j-1} y_{i+n-(j-1)} + \cdots + (-1)^n y_i] \\ &= y_{i+n+1} - (c_n^0 + c_n^1) y_{i+n} + \cdots \\ &\quad + (-1)^j (c_n^{j-1} + c_n^j) y_{i+n+1-j} + \cdots \\ &\quad + (-1)^{n+1} y_i \\ &= y_{i+n+1} - c_{n+1}^1 y_{i+n} + \cdots \\ &\quad + (-1)^j c_{n+1}^j y_{i+n+1-j} + \cdots + (-1)^{n+1} y_i\end{aligned}$$

故等式（1）对任何自然数 k 均成立。注意：$c_n^{j-1} + c_n^j = c_{n+1}^j$。

（2） 令 $x = x_n$，代入(4.13)式，且注意$x_k = x_0 + kh$，得

$$\begin{aligned}y_n &= y_0 + n\Delta y_0 + \frac{n(n-1)}{2!}\Delta^2 y_0 + \cdots \\ &\quad + \frac{n(n-1)\cdots 2\cdot 1}{n!}\Delta^n y_0 \\ &= y_0 + c_n^1 \Delta y_0 + c_n^2 \Delta^2 y_0 + \cdots + c_n^n \Delta^n y_0\end{aligned}$$

故等式（2）成立。

（3）证明，依差分定义，有如下等式：

$$\Delta^k y_0 = \Delta^{k-1} y_1 - \Delta^{k-1} y_0$$

$$\Delta^k y_1 = \Delta^{k-1} y_2 - \Delta^{k-1} y_1$$

$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$

$$\Delta^k y_n = \Delta^{k-1} y_{n+1} - \Delta^{k-1} y_n$$

上述等式两边相加，得

$$\Delta^k y_0 + \Delta^k y_1 + \cdots + \Delta^k y_n = \Delta^{k-1} y_{n+1} - \Delta^{k-1} y_0$$ 证完。

12　解　由高等代数知 $\varphi(\lambda) = |A - \lambda E|$ 为≤3 次多项式。由于 n 次多项式与 n 次插值多项式相等。故任选 λ 的四个值 $\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ 作为节点，计算出它们相应的函数值 $\varphi(\lambda_i)(i=0,1,2,3)$。按此数据作插值多项式，便是所求特征多项式 $\varphi(\lambda)$。具体做法如下：因为

$$\varphi(\lambda) = \begin{vmatrix} 2-\lambda & -1 & 0 \\ -1 & 2-\lambda & -1 \\ 0 & -1 & 2-\lambda \end{vmatrix}$$

令　$\lambda = 1$，代入　$\varphi(\lambda)$中，计算出$\varphi(1) = -1$，同理计算出 $\varphi(2) = 0$，$\varphi(3) = 1$，$\varphi(4) = -4$。列差分表：

i	λ_i	φ_i	$\Delta\varphi_i$	$\Delta^2\varphi_i$	$\Delta^3\varphi_i$
0	1	-1			
1	2	0	1		
2	3	1	1	0	
3	4	-4	-5	-6	-6

此时 $n=3$，代入（4.13）式

$$f_3(\lambda) = -1 + \frac{1}{1}(\lambda - 1) + 0 + $$

$$+ \frac{-6}{3!1^3}(\lambda-1)(\lambda-2)(\lambda-3)$$

$$= -\lambda^3 + 6\lambda^2 - 10\lambda + 4$$

故　　$\varphi(\lambda) = -\lambda^3 + 6\lambda^2 - 10\lambda + 4$

习　题　4.5

1　解　设插值多项式 $H_3(x)$，满足所给的已知条件，按牛顿插值构造思想，它可表为

$$H_3(x)=L_2(x)+k(x-1)(x-2)(x-3)$$

其中　$L_2(x)=f_2(x)=3x^2-7x+6$

为确定k值，对前式求导，得

$$H'_3(x)=L'_2(x)+k[(x-1)(x-2)+ \\ +(x-1)(x-3)+(x-2)(x-3)]$$

令$x=2$，代入上式，且注意插值条件$H'_3(2)=3$，得

$$H'_3(2)=L'_2(2)+k(-1)=3$$

因为　$L'_2(2)=5$，所以$k=2$，于是

$$H_3(x)=3x^2-7x+6+2(x-1)(x-2)(x-3) \\ =2x^3-9x^2+15x-6$$

最后，经验证，$H_3(x_i)=f_i$　　$(i=0,1,2)$，及 $H'_3(2)=3$。

余项由（5.22）得（此时$n=2,m=0$）

$$R(H,f)=\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-1)(x-2)^2(x-3)$$

2　证明　令　$x_0=x_j$，$x_1=x_{j+1}$ 且相应地记函数值为 $y_0=y_j$，$y_1=y_{j+1}$及$y'_0=m_j$，$y'_1=m_{j+1}$ 将其代入（5.20）中便得$H(x)=S_j(x)$（或直接构造之）。

3　解　令　$x_0=1$，$x_1=2$，代入(5.20)得

$$H(x)=\left(1+2\frac{x-1}{2-1}\right)\left(\frac{2-x}{2-1}\right)^2\times 2+ \\ +\left(1+2\frac{2-x}{2-1}\right)\left(\frac{x-1}{2-1}\right)^2\times 3+ \\ +(x-1)\left(\frac{2-x}{2-1}\right)^2\times 1$$

$$+(x-2)\left(\frac{x-1}{2-1}\right)^2 \times(-1)$$

$$=-2x^3+8x^2-9x+5$$

4　解　令　$x_0=0°=0$，$x_1=30°=\frac{\pi}{6}$，$x=15°=\frac{\pi}{12}$。代入（5.20）　得

$$H_3\left(\frac{\pi}{12}\right)=0.250+\frac{\pi}{48}(1.000-0.866)=0.259$$

故

$$\sin 15° \doteq 0.259$$

5　证明　因为没有公式可以套用，所以只好用基本插值构造思想求之。

设$\widetilde{S}_j(x)$为满足已知条件的埃尔米特插值多项式，且记为

$$\widetilde{S}_j(x)=h_1(x)y_j+h_2(x)y_{j+1}+$$
$$+h_3(x)M_j+h_4(x)M_{j+1} \qquad (1)$$

其中$h_1(x),h_2(x),h_3(x),h_4(x)$为待定函数。为确定$h_i(x)$，对上式求二次导数，得

$$\widetilde{S}''_j(x)=h''_1(x)y_j+h''_2(x)y_{j+1}$$
$$+h''_3(x)M_j+h''_4(x)M_{j+1} \qquad (2)$$

令$x=x_j$代入（1）式，且注意条件$\widetilde{S}_j(x_j)=y_j$，得

$$\widetilde{S}_j(x_j)=h_1(x_j)y_j+h_2(x_j)y_{j+1}+h_3(x_j)M_j+$$
$$+h_4(x_j)M_{j+1}=y_j$$

要使上式成立，只要取

$$h_1(x_j)=1,h_2(x_j)=0,h_3(x_j)=0,\ h_4(x_j)=0 \qquad (3)$$

同理，令$x=x_{j+1}$，代入(1)，且注意条件$\widetilde{S}_j(x_{j+1})=y_{j+1}$，得条件：

$$h_1(x_{j+1})=0,\ h_2(x_{j+1})=1,\ h_3(x_{j+1})=0,$$
$$h_4(x_{j+1})=0 \qquad (4)$$

同理，令$x=x_j$，$x=x_{j+1}$代入（2），得条件：

$$h''_1(x_j)=0,h''_2(x_j)=0,h''_3(x_j)=1,\ h''_4(x_j)=0 \qquad (5)$$

及

$$h''_1(x_{j+1})=0,\ h''_2(x_{j+1})=0,\ h''_3(x_{j+1})=0,$$

$$h''_4(x_{j+1})=1 \tag{6}$$

于是由（3）、（4）、（5）、（6）分别可确定 $h_j(x)$ $(j=1,2,3,4)$。

首先确定$h_3(x)$。它是由条件

$$h_3(x_j)=0,\ h_3(x_{j+1})=0,\ h''_3(x_j)=1,\ h''_3(x_{j+1})=0$$

确定的．依上面条件，设

$$h_3(x)=(a_3x+b_3)(x-x_j)(x_{j+1}-x) \tag{7}$$

其中a_3，b_3为待定常数．对上式求二阶导数，得

$$h''_3(x)=-2[a_3(3x-x_j-x_{j+1})+b_3] \tag{8}$$

令$x=x_j,x_{j+1}$代入上式，得

$$h''_3(x_j)=-2[a_3(2x_j-x_{j+1})+b_3]=1$$

$$h''_3(x_{j+1})=-2[a_3(2x_{j+1}-x_j)+b_3]=0$$

从上面二个方程的方程组中，解得

$$a_3=\frac{1}{6(x_{j+1}-x_j)},\quad b_3=-\frac{2x_{j+1}-x_j}{6(x_{j+1}-x_j)}$$

代入（7）式，整理得

$$h_3(x)=\frac{\{(x_{j+1}-x)^2-h_j^2\}(x_{j+1}-x)}{6h_j} \tag{9}$$

其中 $h_j=x_{j+1}-x_j$。

又因为$\widetilde{S}_j(x)$是关于 x_j，x_{j+1} 的对称函数，所以，依其对称性，立刻推得

$$h_4(x)=\frac{\{(x-x_j)^2-h_j^2\}(x-x_j)}{6h_j} \tag{10}$$

其次由条件 $h_1(x_j)=1,\ h_1(x_{j+1})=0$

$h''_1(x_j)=0,\ h''_1(x_{j+1})=0$

确定 $h_1(x)$。为此设

$$h_1(x)=a_1(x_{j+1}-x) \tag{11}$$

显然，满足 $h_1(x_{j+1})=0,\ h''_1(x_j)=h''_1(x_{j+1})=0$。

令　$x=x_j$ 代入（11）式中，得

$$h_1(x_j)=a_1(x_{j+1}-x_j)=1$$

即

$$a_1=\frac{1}{h_j}$$

从而

$$h_1(x)=\frac{x_{j+1}-x}{h_j} \tag{12}$$

又由对称性，有

$$h_2(x)=\frac{x-x_j}{h_j} \tag{13}$$

将（9）、（10）、（12）、（13）代入（2），再整理便得所求的$\widetilde{S}_j(x)$。

6　解　令$x_j=x_0$，$x_{j+1}=x_1$，代入（5.19）式得

$$S_j(x)=f(x_j)+f(x_j,x_{j+1})(x-x_j)+$$

$$+\left\{\frac{f(x_j,x_{j+1})-m_j}{x_{j+1}-x_j}+\right.$$

$$\left.+\frac{m_{j+1}+m_j-2f(x_j,x_{j+1})}{(x_{j+1}-x_j)^2}(x-x_j)\right\}$$

$$\times(x-x_{j+1})(x-x_j)$$

即题2的爱尔米特—牛顿插值多项式。

对题5，没有现成公式可以套用，只好按牛顿构造思想去构造此公式。

设　$$\widetilde{S}_j(x)=f_1(x)+A_1(x-x_j)(x-x_{j+1})+$$
$$+A_2(x-x_j)^2(x-x_{j+1}) \tag{1}$$

其中　$f_1(x)=y_j+f(x_j,x_{j+1})(x-x_j)$

对上式求二次导数得

$$\widetilde{S}''_j(x)=2A_1+2A_2(3x-2x_j-x_{j+1}) \tag{2}$$

令 $x=x_j$，x_{j+1}代入上式，得

$$\widetilde{S}''_j(x_j)=2A_1+2A_2(x_j-x_{j+1})=M_j$$
$$\widetilde{S}''_j(x_{j+1})=2A_1+4A_2(x_{j+1}-x_j)=M_{j+1}$$

解上述方程组，得

$$A_1=(M_{j+1}+2M_j)/6,$$
$$A_2=(M_{j+1}-M_j)/6(x_{j+1}-x_j)$$

代入（1）得

$$\widetilde{S}_j(x)=f(x_j)+f(x_j,x_{j+1})(x-x_j)+$$
$$+\frac{M_{j+1}+2M_2}{6}(x-x_j)(x-x_{j+1})+$$
$$+\frac{M_{j+1}-M_j}{6(x_{j+1}-x_j)}(x-x_j)^2(x-x_{j+1})$$

它就是题 5 的爱尔米特—牛顿插值形式。

可以验证它们都满足插值条件。

7 解 因为已知 $m=n$，所以，由（5.11）得

$$H(x)=f_n(x)+p_n(x)\omega(x)$$

其中

$$p_n(x)=\sum_{i=0}^{n}p_n(x_0,x_1,\cdots,x_i)(x-x_0)\cdots(x-x_{i-1})$$

$$p_n(x_i)=\frac{y'_i-f'_n(x_i)}{\omega'(x_i)}$$

称上式为爱尔米特—牛顿形式插值多项式。

或者由（5.15）得

$$H(x)=\sum_{i=0}^{n}h_i(x)\ y_i+\sum_{i=0}^{n}\bar{h}_i(x)y'_i$$

其中

$$\bar{h}_i(x)=(x-x_i)[l_{n,i}(x)]^2$$
$$h_i(x)=[1-2l'_{n,i}(x_i)\cdot(x-x_i)][l_{n,i}(x)]^2$$

其中

$$l_{n,i}(x)=\frac{\omega_n(x)}{(x-x_i)\omega'_n(x_i)}$$

$$\omega_n(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$$

称上式为爱尔米特—拉格朗日形式插值多项式。

其余项由（5.22）推得

$$R(H,f)=\frac{f^{2(n+1)}(\xi)}{[2(n+1)]!}[\omega_n(x)]^2$$

其中 ξ 在 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 及 x 所确定的区间内。

8　解　因没有固定公式可以套用，故采用构造办法求之。

设所求插值多项式为 $H_2(x)$，依据条件，可以设

$$H_2(x)=f_1(x)+k(x-x_0)(x-x_2) \tag{1}$$

其中

$$f_1(x)=f(x_0)+f(x_0,x_2)(x-x_0)$$

对上式求导数．得

$$H'_2(x)=f'_1(x)+k(2x-x_0-x_2)$$

令 $x=x_1$ 代入上式得

$$H'_2(x_1)=f(x_0,x_2)+k(2x_1-x_0-x_2)=y'_1$$

即

$$k=\frac{y'_1-f(x_0,x_2)}{2x_1-x_0-x_2}$$

于是，代入（1），得所求插值多项式

$$H_2(x)=f(x_0)+f(x_0,x_1)(x-x_0)+$$
$$+\frac{y'_1-f(x_0,x_2)}{2x_1-x_0-x_2}(x-x_0)(x-x_2)$$

可以验证 $H_2(x)$满足插值条件的。

9　解　依条件，设所求插值多项式 $H_3(x)$为

$$H_3(x)=f_1(x)+k(x)(x-x_0)(x-x_2) \tag{1}$$

其中 $k(x)=ax+b$　为待定常数。

对（1）求一次导数，得

$$H'_3(x)=f'_1(x)+k'(x)(x-x_0)(x-x_2)+$$

$$+k(x)(2x-x_0-x_2) \tag{2}$$

再求一次导数，得

$$H''_3(x)=f''_1(x)+2k'(x)(2x-x_0-x_2)+2k(x) \tag{3}$$

令$x=x_1$，代入（2）、（3）且注意插值条件，得

$$H'_3(x_1)=f'_1(x)+k'(x_1)(x_1-x_0)(x_1-x_2)+$$
$$+k(x_1)(2x_1-x_0-x_2)=y'_1 \tag{4}$$

及

$$H''_3(x_1)=f''_1(x_1)+2k'(x_1)(2x_1-x_0-x_2)+2k(x_1)$$
$$=y''_1 \tag{5}$$

其中$f'_1(x_1)=f(x_0,\ x_2)$，$f''_1(x_1)=0$，$k'(x_1)=a$，从（4）、（5）解得

$$a=\frac{\dfrac{2x_1-x_0-x_2}{2}y''_1-y'_1+f(x_0,x_2)}{(x_1-x_0)^2+(x_1-x_0)(x_1-x_2)+(x_1-x_2)^2} \tag{6}$$

$$b=\frac{y''_1}{2}-a(3x_1-x_0-x_2)$$

代入（1），整理得

$$H_3(x)=f(x_0)+f(x_0,x_2)(x-x_0)+$$
$$+\frac{y''_1}{2}(x-x_0)(x-x_2)+$$
$$+a(x-x_1+x_0+x_2-2x_1)(x-x_0)(x-x_2)$$

其中a由（6）式确定的。

习　题 4.6

1　解　此时，$n=2$，$h_j=1$，代入（6.10），计算α_j、β_j：

$$\alpha_1=\frac{h_0}{h_0+h_1}=\frac{1}{2}$$

$$\beta_1 = 3\left[\frac{1-\alpha_1}{h_0}(y_1 - y_0) + \frac{\alpha_1}{h_1}(y_2 - y_1)\right] = 15.$$

将它们代入（6.11）得

$$\left(1-\frac{1}{2}\right)m_0 + 2m_1 + \frac{1}{2}m_2 = 15$$

又因已知$m_0 = 1$，$m_2 = -1$，故$m_1 = 7.5$。

最后，由（6.7）得在[1,3]上的三次样条函数为

$$S(x) = \begin{cases} (2-x)^2(x-1) - 7.5(x-1)^2(2-x) + \\ \quad + 2(2-x)^2(2(x-1)+1) + \\ \quad + 4(x-1)^2(2(2-x)+1) & x \in [1,2] \\ 7.5(3-x)^2(x-2) + (x-2)^2(3-x) + \\ \quad + 4(3-x)^2(2(x-2)+1) + \\ \quad + 12(x-2)^2(2(3-x)+1) & x \in [2,3] \end{cases}$$

或整理成

$$S(x) = \begin{cases} 4.5x^3 - 17x^2 + 21.5x - 7 & x \in [1,2] \\ -9.5x^3 + 67x^2 - 146.5x + 105 & x \in [2,3] \end{cases}$$

2　解　此题推导基本上与曲率边界的三次样条函数相同。

假定 $M_j(j=1,2,\cdots,n-1)$ 已求出，则所求的三次样条函数$\widetilde{S}(x)$的在$[x_j, x_{j+1}]$上的分段函数$\widetilde{S}_j(x)$ 由习题4.5 第 5 题求得

$$\widetilde{S}_j(x) = \frac{M_j(x_{j+1}-x)^3}{6h_j} + \frac{M_{j+1}(x-x_j)^3}{6h_j} + \\ + \left(y_j - \frac{M_j h_j^2}{6}\right)\frac{x_{j+1}-x}{h_j} + \\ + \left(y_{j+1} - \frac{M_{j+1}h_j^2}{6}\right)\frac{x-x_j}{h_j}$$

$$j = 1,2,\cdots,n-1 \qquad (1)$$

其中 $h_j = x_{j+1} - x_j$。

为了确定 $M_j(j=1,2\cdots,n-1)$，对（1）式求一次导数，得

$$S'_j(x) = -M_j\frac{(x_{j+1}-x)^2}{2h_j} + M_{j+1}\frac{(x-x_j)^2}{2h_j} +$$

$$+\frac{y_{j+1}-y_j}{h_j} - \frac{M_{j+1}-M_j}{6}h_j \qquad (2)$$

令 $x=x_j$ 代入（2）式，且注意插值条件

$$S'_{j-1}(x_j) = S'_j(x_j)$$

整理得

$$\left(\frac{h_j}{6}\right)M_{j+1} + \left(\frac{h_{j-1}+h_j}{3}\right)M_j + \left(\frac{h_{j-1}}{6}\right)M_{j-1}$$

$$=\left(\frac{1}{h_j}\right)f(x_{j+1}) - \left(\frac{1}{h_j}+\frac{1}{h_{j-1}}\right)f(x_j) +$$

$$+\left(\frac{1}{h_{j-1}}\right)f(x_{j-1}) \qquad (j=1,2,\cdots,n-1) \qquad (3)$$

因此，解方程组（3）得 M_j，再将 M_j 代入（1），最后，由分段函数组成整体的曲率边界三次样条函数 $\widetilde{S}(x)$。

3　解　因 $n=3$，$h_j=1(j=0,1,2)$，代入上题（3）式中，得

$j=1$　　$\frac{1}{6}M_2 + \frac{2}{3}M_1 + \frac{1}{6}M_0 = f(x_2) + 2f(x_1) + f(x_0)$

$j=2$　　$\frac{1}{6}M_3 + \frac{2}{3}M_2 + \frac{1}{6}M_1 = f(x_3) + 2f(x_2) + f(x_1)$

将已知数据代入，得

$$\frac{1}{6}M_2 + \frac{2}{3}M_1 = 7$$

$$\frac{2}{3}M_2 + \frac{1}{6}M_1 = 23$$

解得

$$M_2 = 34,\ M_1 = 2$$

最后将 M_2，M_1 代入 $\widetilde{S}_j(x)(j=0,1,2)$，且整理汇合成 $\widetilde{S}(x)$，即

$$\widetilde{S}(x) = \begin{cases} \frac{1}{3}x(x^2+5) & x\in[0,1] \\ \frac{1}{3}(16x^3-45x^2+26x+9) & x\in[1,2] \\ \frac{1}{3}(-14x^3+135x^2-370x+321) & x\in[2,3] \end{cases}$$

习　题 4.7

1　解　因为公式中用到等距的三个节点 x_0、x_1、x_2，所以，此时 $n=2$。将具体 n 值代入 (7.11)、(7.12) 及 (7.9)，得

$$f'_2(x)=\frac{1}{h}\left(\Delta y_0+\frac{2t-1}{2}\Delta^2 y_0\right)$$

$$R'_2(f,x)=\frac{h^2}{3!}\frac{d}{dt}(f^{(3)}(\xi)\omega(t))$$

$$=\frac{h^2}{3!}(\omega'(t)f^{(3)}(\xi)+\omega(t)(f^{(3)}(\xi))')$$

其中 $\omega(t)=t(t-1)(t-2)$，及

$$f'(x)=f'_2(x)+R'_2(f,x)$$

又因为 $x=x_0$，所以 $t=0$。代入以上各式，得

$$f'_2(x_0)=\frac{1}{h}\left(\Delta y_0-\frac{1}{2}\Delta^2 y_0\right)$$

$$=\frac{1}{2h}(-3f_0+4f_1-f_2)$$

$$R'_2(f,x_0)=\frac{h^2}{3!}\cdot 2f^{(3)}(\xi)=\frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi)$$

于是便推得所求数值微分公式

$$f'(x_0)=\frac{1}{2h}(-3f_0+4f_1-f_2)+\frac{h^2}{3}f'''(\xi)$$

2　解　因为公式中用到等距的四个节点 x_0,x_1,x_2,x_3，所以，此时 $n=3$。将具体 n 值代入 (7.11)、(7.12) 及 (7.9)，得

$$f'_3(x)=\frac{1}{h}\left(\Delta y_0+\frac{2t-1}{2}\Delta^2 y_0+\frac{3t^2-6t+2}{6}\Delta^3 y_0\right)$$

$$R'_3(f,x)=\frac{h^3}{4!}(\omega'(t)f^{(4)}(\xi)+\omega(t)(f^{(4)}(\xi))')$$

其中$\omega(t)=t(t-1)(t-2)(t-3)$，则

$$f'(x)=f'_3(x)+R'_3(f,x) \tag{1}$$

又因为 $x=x_0$，所以 $t=0$. 代入以上各式，得

$$f'_3(x_0)=\frac{1}{h}\left(\Delta y_0-\frac{1}{2}\Delta^2 y_0+\frac{1}{3}\Delta^3 y_0\right)$$

$$=\frac{1}{6h}(-11f_0+18f_1-9f_2+2f_3)$$

$$R'_3(f,x_0)=\frac{h^3}{4!}(-1)(-2)(-3)f^{(4)}(\xi)$$

$$=-\frac{h^3}{4}f^{(4)}(\xi)$$

代入（1），便得所求公式.

3　解　先作差分表

i	x_i	y_i	Δy_i	$\Delta^2 y_i$	$\Delta^3 y_i$
0	1.0	8.00			
1	1.5	13.75	5.75		
2	2.0	21.00	7.25	1.50	
3	2.5	29.75	8.75	1.50	0.00

又因为 $h=0.5$，$x=x_0=1.0$，所以 $t=0$. 代入式(7.11)，得

$$f'_n(x_0)=f'_n(1.0)=\frac{1}{0.5}\left(5.75-\frac{1}{2}\times 1.50\right)$$

$$=10.00$$

故$f'(1.0)=10.00$.

注：因为已知节点个数为4，所以，可以套用上题的公式进行计算. 即

$$f'_3(1.0)=\frac{1}{6\times 0.5}(-11\times 8.00+18\times 13.75-9\times$$

$\times 21.00+2\times 29.75)=10.00$

4　解　因为节点是等距的，所以，先作差分表：

i	x_i	y_i	Δy_i	$\Delta^2 y_i$	$\Delta^3 y_i$	$\Delta^4 y_i$
0.2	0.2	0.20134				
0.4	0.4	0.41075	0.20941			
0.6	0.6	0.63665	0.22590	0.01649		
0.8	0.8	0.88811	0.25146	0.02556	0.00907	
1.0	1.0	1.17520	0.28709	0.03563	0.01007	0.00100

又因为 $h=0.2$，$x=x_0=0.2$，所以$t=0$。代入（7.11）得

$$f'_4(0.2)=\frac{1}{0.2}\left(0.20941-\frac{1}{2}\times 0.01649+\frac{1}{3}\times\right.$$

$$\left.\times 0.00907-\frac{1}{4}\times 0.00100\right)=1.01969$$

故$f'(0.2)\doteq 1.01969$。

习　题　4.8

1　解　根据已知条件及所求的近似多项式$g(x)$的次数，知$n=4$。$m=1$。按（8.4）计算

$$S_0=\sum_{i=0}^{4}x_i^0=5,\qquad f_0=\sum_{i=0}^{4}y_i=14.9$$

$$s_1=\sum_{i=0}^{4}x_i=11,\qquad f_1=\sum_{i=0}^{4}y_ix_i=44.3$$

$$s_2=\sum_{i=0}^{4}x_i^2=39$$

以上各值代入（8.5），得正规方程组

$$\begin{cases}5a_0+11a_1=14.9\\11a_0+39a_2=44.3\end{cases}$$

解得

$$a_0 = \frac{93.8}{74}, \qquad a_1 = \frac{57.6}{74}$$

从而所求的经验直线为

$$g(x) = \frac{57.6}{74}x + \frac{93.8}{74} \doteq 0.7784x + 1.2676$$

2　解　因为所求的经验公式是关于 θ 的二次多项式，但其中常数项为零，所以，不能直接套用（8.4）、（8.5）来求出$g(x)$。为此，按最小二乘法的定义来推导其求法。

设其偏差平方和为

$$\sum_{i=0}^{3} (a\theta_i + b\theta_i^2 - y_i)^2 = \varphi(a,b)$$

要使$\varphi(a,b)$达到极小，必有

$$\frac{\partial\varphi}{\partial a} = 2\sum_{i=0}^{3} (a\theta_i + b\theta_i^2 - y_i)\theta_i = 0$$

$$\frac{\partial\varphi}{\partial b} = 2\sum_{i=0}^{3} (a\theta_i + b\theta_i^2 - y_i)\theta_i^2 = 0$$

从而，得

$$\begin{cases} a\sum_{i=0}^{3}\theta_i^2 + b\sum_{i=0}^{3}\theta_i^3 = \sum_{i=0}^{3} y_i\theta_i \\ a\sum_{i=0}^{3}\theta_i^3 + b\sum_{i=0}^{3}\theta_i^4 = \sum_{i=0}^{3} y_i\theta_i^2 \end{cases}$$

按已知数组计算出

$$\begin{cases} 30a + 100b = 17.2 \\ 100a + 354b = 55 \end{cases}$$

解得

$$a = \frac{58.88}{62}, \qquad b = -\frac{7}{62}$$

故所求的经验公式为

$$g(x)=\frac{58.88}{62}\theta-\frac{7}{62}\theta^2\doteq(0.9497-0.1129\theta)\theta$$

3　解　因为只有这样取法，才能使其偏差平方和为最小。事实上，设$\overline{x}$为所求的近似值，则其偏差的平方和为

$$\sum_{i=1}^{n}(\overline{x}-x_i)^2=\varphi(\overline{x})$$

为使其达到最小，必须满足

$$\frac{\partial\varphi(\overline{x})}{\partial\overline{x}}=2\sum_{i=1}^{n}(\overline{x}-x_i)=0$$

即

$$n\overline{x}=\sum_{i=1}^{n}x_i$$

故

$$\overline{x}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_i$$

这就是说近似值$\overline{x}$，是在最小平方逼近意义下，最好的近似值。

4　解　对经验公式两边取自然对数，得

$$lnI=lnI_0-atlne=lnI_0-at$$

设　$y=lnI$，　$A=lnI_0$，　$B=-a$

则

$$y=A+Bt \qquad (1)$$

试验数据经变换（1）后，得数表如下：

t	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8
y_i	1.1506	0.8671	0.5596	0.2927	0	−0.3567	−0.5798

利用（8.4）求出

$$S_0=\sum_{i=0}^{6}t_i^0=7,\qquad f_0=\sum_{i=0}^{6}y_i=1.9335$$

$$S_1=\sum_{i=0}^{6}t_i=3.5,\qquad f_1=\sum_{i=0}^{6}t_iy_i=0.3707$$

$$S_2=\sum_{i=0}^{6}t_i^2=1.95,$$

代入（8.5）得正规方程组

$$\begin{cases}7A+3.5B=1.9335\\3.5A+1.95B=0.3707\end{cases}$$

解得

$$A=1.7662,\ B=-2.9799$$

最后，进行逆变换，即得

$$I_0=e^A=5.8485,\ \alpha=-B=2.9799$$

因而，所求经验公式为

$$I=5.8485e^{-2.9799t}$$

5　**解**　设所求的近似解为 x_1、x_2，则其偏差为

$$u_1=x_1-15.5$$

$$u_2=x_2-6.1$$

$$u_3=x_1-x_2-20.9$$

于是，偏差平方和为

$$\varphi(x_1,x_2)=\sum_{i=1}^{3}u_i^2=(x_1-15.5)^2+(x_2-6.1)^2+$$
$$+(x_1+x_2-20.9)^2$$

对上式求偏导数，得

$$\frac{\partial\varphi}{\partial x_1}=2x_1+x_2-36.4=0$$

$$\frac{\partial\varphi}{\partial x_2}=x_1+2x_2-27=0$$

解得

$$x_1=15\frac{4}{15},\quad x_2=5\frac{13}{15}$$

故此矛盾方程组的近似解为

$$x_1 = 15\frac{4}{15}, \quad x_2 = 5\frac{13}{15}$$

习　　题　4.9

1　**证明**　当 $n=1$时，$\cos\theta = 2^0\cos\theta$，显然成立。

设$n=k$时成立，即

$$\cos k\theta = 2^{k-1}\cos^k\theta + a_{k-1}\cos^{k-1}\theta + \cdots + a_1\cos\theta + a_0$$

今证 $n=k+1$时，也成立。因为

$$\cos(k+1)\theta = 2\cos k\theta\cdot\cos\theta - \cos(k-1)\theta$$

将 $\cos k\theta$、$\cos(k-1)\theta$ 展开，且合并同类项．上式变为

$$\cos(k+1)\theta = 2^k\cos^{k+1}\theta + a_k\cos^k\theta + \cdots + a_1\cos\theta + a_0$$

其中　$a_j(j=0,1,\cdots,k)$是由 $\cos k\theta$、$\cos(k-1)\theta$ 的展开式系数组合而成的．于是，问题得证．

2　**证明**　由定义知

$$T_n(x) = \cos n\theta$$

其中$x=\cos\theta$，$x\in[-1,1]$，$\theta\in[0,\pi]$。则令

$$T_n(-x) = \cos n\theta'$$

其中$-x=\cos\theta'$，$-x\in[-1,1]$于是，从

$$\cos\theta = -\cos\theta'$$

推得

$$\theta' = \theta + \pi$$

即有

$$\begin{aligned} T_n(-x) &= \cos n\theta' = \cos n(\theta+\pi) \\ &= \cos n\theta\cdot\cos n\pi - \sin n\theta\cdot\sin n\pi \\ &= (-1)^n\cos n\theta = (-1)^n T_n(x) \end{aligned}$$

此式说明，当n为偶数时，$T_n(x)$为偶函数，且只含偶次幂项．同理，当n为奇数时，$T_n(x)$为奇函数，且只含有奇次幂项．

显然，$T_n(x)$，当 $n=0$，　1，π时，它们的系数是正负相

间的。

假定$n=k$时均成立，即

$$T_k(x)=a'_k x^k-a'_{k-2}x^{k-2}+a'_{k-4}x^{k-4}-\cdots+$$
$$+(-1)^{\left[\frac{k}{2}\right]}a'_0$$

其中a'_j均为正值，$\left[\frac{k}{2}\right]$表示取$k/2$的整数部分．为了证明需要，把 $T_{k-1}(x)$记成

$$T_{k-1}(x)=a''_{k-1}x^{k-1}-a''_{k-3}x^{k-3}+a''_{k-5}x^{k-5}-\cdots+$$
$$+(-1)^{\left[\frac{k-1}{2}\right]}a''_0$$

其中a''_j均为正值。

今证 $n=k+1$时 $T_{k+1}(x)$的系数的符号也是正负相间的。由逆推关系式

$$T_{k+1}(x)=2xT_k(x)-T_{k-1}(x)$$

代入 $T_k(x)$、$T_{k-1}(x)$ 的展开式，且合并同类项，得

$$T_{k+1}(x)=a_{k+1}x^{k+1}-a_{k-1}x^{k-1}+a_{k-3}x^{k-3}-\cdots+$$
$$+(-1)^{\left[\frac{k-1}{2}\right]}a_0$$

其中　$a_j=2a'_{j-1}+a''_j$　$(j=k-1,k-3,\cdots)$

$$a_0=a''_0,\quad a_{k+1}=2a'_k$$

这就证明了$T_{k+1}(x)$的系数符号也是正负相间的。

3　解　引入线性变换

$$x=\frac{2t-(b+a)}{b-a} \tag{1}$$

将变量$t\in[a,b]$变到变量$x\in[-1,1]$．于是

$$T_n(x)=T_n\left(\frac{2t-(b+a)}{b-a}\right)=T_n(t)$$

变成关于 t 的 n 次多项式．又因 $T_n(x)$ 的首项为 $2^{n-1}x^n$，则 $T_n\left(\frac{2t-(a+b)}{b-a}\right)$的首项为

$$2^{n-1}\left(\frac{2t-(a+b)}{b-a}\right)^n=2^{n-1}\left[\left(\frac{2t}{b-a}\right)^n-\right.$$

$$-n\left(\frac{2t}{b-a}\right)^{n-1}\left(\frac{a+b}{b-a}\right)+\cdots\Big]=\frac{1}{2}\left(\frac{4}{b-a}\right)^{n}t^{n}-\cdots$$

推得此时首项系数为

$$\frac{1}{2}\left(\frac{4}{b-a}\right)^{n}$$

也可导出其递推关系式：因

$$T_{n+1}(x)=2xT_n(x)-T_{n-1}(x)$$

其中 $T_0(x)=1$，$T_1(x)=x$ 用变换（1），代入得

$$T_{n+1}(t)=2\left(\frac{2}{b-a}t-\frac{b+a}{b-a}\right)T_n(t)-T_{n-1}(t)$$

其中 $T_0(t)=1$，$T_1(t)=\frac{2}{b-a}t-\frac{b+a}{b-a}$。

4　证明　因为 n 次勒让德多项式为

$$p_n(x)=\frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n$$

故

$$\int_{-1}^{1}p_n^2(x)dx=\frac{1}{(2^n n!)^2}\int_{-1}^{1}\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n\cdot\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n dx$$

反复利用分部积分法，有

$$\int_{-1}^{1}\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n\cdot\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n dx$$

$$=\left[\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n\cdot\frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}(x^2-1)^n\right]\Bigg|_{-1}^{1}-$$

$$-\int_{-1}^{1}\frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}(x^2-1)^n\cdot\frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}}(x^2-1)^n dx$$

$$=-\int_{-1}^{1}\frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}}(x^2-1)^n\cdot\frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}(x^2-1)^n dx$$

$$=(-1)^2\int_{-1}^{1}\frac{d^{n+2}}{dx^{n+2}}(x^2-1)^n\cdot\frac{d^{n-2}}{dx^{n-2}}(x^2-1)^n dx$$

……

$$=(-1)^n\int_{-1}^{1}\frac{d^{2n}}{dx^{2n}}(x^2-1)^n\cdot(x^2-1)^n dx$$

$$=(-1)^n(2n)!\int_{-1}^{1}(x^2-1)^n dx$$

又因为

$$(-1)^n\int_{-1}^{1}(x^2-1)^n dx=\frac{(n!)^2}{(2n)!}\cdot\frac{2^{2n+1}}{2n+1}$$

代入原积分，得

$$\int_{-1}^{1}p_n^2(x)dx=\frac{1}{(2^n n!)^2}\cdot(2n)!\cdot\frac{(n!)^2}{(2n)!}\cdot\frac{2^{2n+1}}{2n+1}$$

$$=\frac{2}{2n+1}$$

5　**证明**　设 n 次勒让德多项式为

$$p_n(x)=\frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n$$

对 $(x^2-1)^n$ 求 n 次导数，得

$$\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n=2n(2n-1)\cdots(n+1)x^n-$$

$$-n(2n-1)\cdots nx^{n-1}+\cdots$$

$$=\frac{(2n)!}{n!}x^n-n\frac{(2n-1)!}{(n-1)!}x^{n-1}+\cdots$$

于是，首项系数为

$$\frac{1}{2^n n!}\cdot\frac{(2n)!}{n!}=\frac{(2n)!}{2^n(n!)^2}$$

6　**证明**　因为

$$p_n(u)=\frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{du^n}[u^2-1]^n$$

所以，令 $u=-x$，有

$$p_n(-x)=\frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{d(-x)^n}[(-x)^2-1]^n$$

$$=(-1)^n\frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n$$

$$= (-1)^n p_n(x)$$

从本题可以看出，当 n 为偶数时，其勒让德多项式是偶函数，否则 n 为奇数时，则它是奇函数。

7 **证明** 设 $f_n(x)$ 为任意 n 次多项式。因为 $\{p_n(x)\}$ 为在区间 $[-1,1]$ 上权 $\rho(x)=1$ 的正交多项式组，所以，由定理 1 知，

$$f_n(x) = C_0 p_0(x) + C_1 p_1(x) + \cdots + C_n p_n(x)$$

其中

$$C_k = \frac{(f_n, p_k)}{(p_k, p_k)} = \frac{2}{2k+1}\int_{-1}^{1} f_n(x) p_k(x) dx$$

8 **证明** （1）因为被积函数 $xp_n^2(x)$ 为奇函数，所以，根据奇函数在对称区间上的积分值等于零的结论，推得

$$\int_{-1}^{1} x p_n^2(x) dx = 0$$

（2）因为函数 $xp_k(x)$ 为小于或等于 $n-1$ 次多项式，所以，由定理 2 知，

$$\int_{-1}^{1} x p_k(x) p_n(x) dx = 0$$

9 **证明** 设 $\overline{p_n}(x)$ 为首项系数为 1 的 n 次多项式，则由定理 3，得

$$\overline{p}_{n+1}(x) = (x - C_n)\overline{p_n}(x) - C_{n-1}\overline{p}_{n-1}(x) \qquad (1)$$

其中

$$C_{n-1} = \frac{(\overline{p_n}, \overline{p_n})}{(\overline{p}_{n-1}, \overline{p}_{n-1})}, \quad C_n = \frac{(x\overline{p_n}, \overline{p_n})}{(\overline{p_n}, \overline{p_n})}$$

又因为 $p_n(x) = \frac{(2n)!}{2^n (n!)^2}\overline{p_n}(x)$，所以，代入 C_{n-1}，C_n 得

$$C_{n-1} = \frac{\left(\frac{2^n (n!)^2}{(2n)!}\right)^2 (p_n, p_n)}{\left(\frac{2^{n-1}((n-1)!)^2}{2(n-1)!}\right)^2 (p_{n-1}, p_{n-1})}$$

$$=\left(\frac{2(n)}{(2n-1)2n}\right)^2 \cdot \frac{\frac{2}{2n-1}}{\frac{2}{2(n-1)+1}}$$

$$=\frac{2n-1}{2n+1}$$

$$C_n=\frac{(xp_n,p_n)}{(p_n,p_n)}=0$$

代入（1）得

$$\frac{2^{n+1}[(n+1)!]^2}{[2(n+1)]!}p_{n+1}(x)=\frac{2^n(n!)^2}{(2n)!}xp_n(x)-$$

$$-\frac{2n-1}{2n+1}\cdot\frac{2^{n-1}[(n-1)!]^2}{[2(n-1)]!}P_{n-1}(x)$$

上式两边除以$\frac{2^n(n!)^2}{(2n)!}$，得

$$\frac{n+1}{2n+1}p_{n+1}(x)=xp_n(x)-\frac{n}{2n+1}p_{n-1}(x)$$

由此命题得证。

10　解　首先，利用台劳级数展开e^x，得

$$e^x=1+x+\frac{x^2}{2!}+\cdots+\frac{x^n}{n!}+\frac{x^{n+1}}{(n+1)!}e^{\xi}\qquad(-1<\xi<1)$$

要想误差不超过0.01，也就是要求余项的绝对值不超过0.01，即　$n=5$时，有

$$\left|\frac{x^6e^{\xi}}{6!}\right|\leqslant\frac{e}{6!}<0.004<0.01$$

从而可知，只要取前六项，就达到精度要求，即

$$e^x\doteq1+x+\frac{x^2}{2!}+\frac{x^3}{3!}+\frac{x^4}{4!}+\frac{x^5}{5!}=f_5(x)\qquad(1)$$

此时，$f_5(x)$ 为五次多项式。但是不是次数最低的多项式。为此，在保证精度的前提下，利用幂函数 $x^k(k=0,1,\cdots,5)$可以用切比雪夫多项式表出的性质：

$$1 = T_0(x), \quad x = T_1(x)$$

$$x^2 = \frac{1}{2}(T_0(x) + T_2(x)), \quad x^3 = \frac{1}{4}(3T_1(x) + T_3)$$

$$x^4 = \frac{1}{8}(3T_0(x) + 4T_2(x) + T_4(x))$$

$$x^5 = \frac{1}{16}(10T_1(x) + 5T_3(x) + T_5(x))$$

代入（1）式，经整理得

$$f_5(x) = \frac{81}{64}T_0(x) + \frac{217}{192}T_1(x) + \frac{13}{84}T_2(x) + + \frac{17}{384}T_3(x) + \frac{1}{192}T_4(x) + + \frac{1}{1920}T_5(x) \qquad (2)$$

因为当 $|x| \leqslant 1$，有 $|T_i(x)| \leqslant 1$，所以，式（2）中省略后两项，即

$$\left| \frac{1}{192}T_4(x) + \frac{1}{1920}T_5(x) \right| \leqslant \frac{1}{192} + \frac{1}{1920} < 0.006$$

因此，若取

$$f_3(x) = \frac{81}{64}T_0(x) + \frac{217}{192}T_1(x) + \frac{13}{84}T_2(x) + \frac{17}{384}T_3(x)$$

则

$$|e^x - f_3(x)| \leqslant |e^x - f_5(x)| + |f_5(x) - f_3(x)| < 0.004 + 0.006 = 0.01$$

也就是，在$[-1, 1]$上，用 $f_3(x)$近似e^x时，误差不超过0.01，且多项式的次数是最低的。

事实上，取 $f_2(x) = \frac{81}{64}T_0(x) + \frac{217}{192}T_1(x) + \frac{13}{84}T_2(x)$，容易验证此时误差已超过精度要求。

最后，还可用$T_i(x)$表示x^i的组合形式，代入$f_3(x)$，经整理得

$$e^x \doteq f_3(x) = \frac{191}{192} + \frac{383}{384}x + \frac{13}{24}x^2 + \frac{17}{38}x^3$$

习　题　4.10

1 **解**　根据题意我们取在$[-1,1]$上以1为权函数的正交多项式为基函数，即勒让德多项式序列$\{p_i(x)\}$。设

$$g_3(x) = a_0p_0(x) + a_1p_1(x) + a_2p_2(x) + a_3p_3(x) \qquad (1)$$

其中

$$p_0(x) = 1,\ p_1(x) = x,\quad p_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1),$$

$$p_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$$

$a_i(i = 0,1,2,3)$为待定系数。

先计算下列各积分值：（按习题4.9第4题）

$$(p_0,p_0) = 2,\ (p_1,p_1) = \frac{2}{3},\quad (p_2,p_2) = \frac{2}{5},$$

$$(p_3,p_3) = \frac{2}{7}$$

又计算积分值

$$(f,p_0) = \int_{-1}^{1} f(x)p_0(x)dx = \int_{-1}^{1} \sin x dx = 0$$

$$(f,p_1) = \int_{-1}^{1} f(x)p_1(x)dx = \int_{-1}^{1} x\sin x dx$$

$$= 2(\sin 1 - \cos 1)$$

$$(f,p_2) = \int_{-1}^{1} \sin x \cdot \frac{1}{2}(3x^2 - 1)dx = 0$$

$$(f,p_3) = \int_{-1}^{1} \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)\cdot \sin x dx$$

$$= 28\cos 1 - 18\sin 1$$

代入（10.5）得

$$a_0 = 0,\ a_1 = 3(\sin 1 - \cos 1),$$

$$a_2 = 0,\ a_3 = 7(14\cos 1 - 9\sin 1)$$

代入（1）式，得

$$g_3(x)=3(\sin1-\cos1)x+$$
$$+\frac{7}{2}(14\cos1-9\sin1)(5x^3-3x)$$
$$=\left[\frac{35}{2}(14\cos1-9\sin1)x^2-\right.$$
$$\left.-3\left(50\cos1-\frac{65}{2}\sin1\right)\right]x$$

2 解 仍然选$\{p_n(x)\}$作为基函数。设

$$g_2(x)=a_0p_0(x)+a_1p_1(x)+a_2p_2(x) \qquad (1)$$

其中 $p_0(x)=1$, $p_1(x)=x$, $p_2(x)=\frac{1}{2}(3x^2-1)$, $a_i(i=0,1,2)$ 为待定系数。

很容易计算出：

$$(p_0,p_0)=2,\quad (p_1,p_1)=\frac{2}{3},\quad (p_2,p_2)=\frac{2}{5}$$

再计算出：

$$(f,p_0)=\int_{-1}^{1}x^4dx=\frac{2}{5}$$

$$(f,p_1)=\int_{-1}^{1}x^5dx=0$$

$$(f,p_2)=\int_{-1}^{1}x^4\cdot\frac{1}{2}(3x^2-1)dx=\frac{8}{35}$$

代入（10.5）得

$$a_0=\frac{1}{5},\quad a_1=0,\quad a_2=\frac{4}{7}$$

代入（1）式，得

$$g_2(x)=\frac{1}{5}+\frac{4}{7}\cdot\frac{1}{2}(3x^2-1)=\frac{6}{7}x^2-\frac{3}{35}$$

即$g_2(x)$为$f(x)=x^4$在$[-1,1]$上的最小平方逼近的二次多项式。

第五章　数值积分习题解答

习　题　5.2

1　解　（1）已知　$x_0=\frac{1}{4}$，$x_1=\frac{1}{2}$，$x_2=\frac{3}{4}$ 由内插求积公式系数表示式（2.6）求得

$$A_0=\int_0^1\frac{\left(x-\frac{1}{2}\right)\left(x-\frac{3}{4}\right)}{\left(\frac{1}{4}-\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{4}-\frac{3}{4}\right)}dx$$

$$=\int_0^1 8\left(x^2-\frac{5}{4}x+\frac{3}{8}\right)dx=\frac{2}{3}$$

$$A_1=\int_0^1\frac{\left(x-\frac{1}{4}\right)\left(x-\frac{3}{4}\right)}{\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{4}\right)\left(\frac{1}{2}-\frac{3}{4}\right)}dx$$

$$=\int_0^1-16\left(x^2-x+\frac{3}{16}\right)dx=-\frac{1}{3}$$

$$A_2=\int_0^1\frac{\left(x-\frac{1}{4}\right)\left(x-\frac{1}{2}\right)}{\left(\frac{3}{4}-\frac{1}{4}\right)\left(\frac{3}{4}-\frac{1}{2}\right)}dx$$

$$=\int_0^1 8\left(x^2-\frac{3}{4}x+\frac{1}{8}\right)dx=\frac{2}{3}$$

即　$A_0=\frac{2}{3}$；　$A_1=-\frac{1}{3}$；　$A_2=\frac{2}{3}$。

（2）　估计代数精确度

因为 $n=2$，具有 3 个节点，根据定理可知，精确度至少是

2 次的。又因为当 $f(x)=x^3$时，

$$\text{左边}=\int_0^1 x^3 dx=\frac{1}{4}x^4\Big|_0^1=\frac{1}{4}$$

$$\text{右边}=\frac{2}{3}\left(\frac{1}{4}\right)^3-\frac{1}{3}\left(\frac{1}{2}\right)^3+\frac{2}{3}\left(\frac{3}{4}\right)^3=\frac{1}{4}$$

即左边 = 右边。

当$f(x)=x^4$ 时

$$\text{左边}=\int_0^1 x^4 dx=\frac{1}{5}$$

$$\text{右边}=\frac{2}{3}\left(\frac{1}{4}\right)^4-\frac{1}{3}\left(\frac{1}{2}\right)^4+\frac{2}{3}\left(\frac{3}{4}\right)^4=\frac{37}{192}$$

故左边≠右边。所以，该插值求积公式具有 3 次代数精确度。

（3）计算$I=\int_0^1 x^2 dx$

$$\int_0^1 x^2 dx\doteq\frac{1}{3}\left[2\left(\frac{1}{4}\right)^2-\left(\frac{1}{2}\right)^2+2\left(\frac{3}{4}\right)^2\right]=\frac{1}{3}$$

实际上，由于该求积公式具有 3 次代数精确度，所以，上式成为精确等式。即

$$\int_0^1 x^2 dx=\frac{1}{3}$$

2　**解**　因为是内插求积公式，所以由(2.6)式得

$$A_0=\int_{-1}^1\frac{(x-0)(x+1)}{(1-0)(1+1)}dx$$

$$=\int_{-1}^1\frac{1}{2}x(x+1)dx=\frac{1}{3}$$

同理可得

$$A_1=\frac{4}{3},\quad A_2=\frac{1}{3}$$

故所求内插求积公式为

$$\int_{-1}^1 f(x)dx\doteq\frac{1}{3}f(1)+\frac{4}{3}f(0)+\frac{1}{3}f(-1)\qquad(1)$$

这是一个闭型求积公式。

下面估计代数精确度。由于$n=2$，为 3 个节点，所以(1)式至少具有 2 次代数精确度。

当 $f(x)=x^3$ 时，有

$$左边 = \int_{-1}^{1} x^3 dx = \frac{1}{4}x^4 \Big|_{-1}^{1} = 0$$

$$右边 = \frac{1}{3}\left[1 - 4\times 0 + (-1)^3 \right] = 0$$

即左边 = 右边。当 $f(x) = x^4$时，有

$$左边 = \int_{-1}^{1} x^4 dx = \frac{1}{5}x^5 \Big|_{-1}^{1} = \frac{2}{5}$$

$$右边 = \frac{1}{3}\left[1 - 4\times 0 + (-1)^4 \right] = \frac{2}{3}$$

所以左边≠右边。故，求积公式（1）具有 3 次代数精确度。

3　**解**　因为求积公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \doteq C[f(x_1) + f(x_2) + f(x_3)]$$

要求具有 3 次代数精确度，故，得到下列方程组

$$\begin{cases} C(1+1+1) = \int_{-1}^{1} dx \\ C(x_1 + x_2 + x_3) = \int_{-1}^{1} x dx \\ C(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) = \int_{-1}^{1} x^2 dx \\ C(x_1^3 + x_2^3 + x_3^3) = \int_{-1}^{1} x^3 dx \end{cases}$$

即　　$C = \frac{2}{3}$

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 0 & (1) \\ x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1 & (2) \\ x_1^3 + x_2^3 + x_3^3 = 0 & (3) \end{cases}$$

解上面方程组，由（1）得

$$x_1 = -x_2 - x_3$$

代入（3），则有

$$(-x_2 - x_3)^3 + x_2^3 + x_3^3 = 0$$

化简、整理，得

$$x_2 + x_3 = 0$$

即

$$x_2 = -x_3$$

把 $x_2=-x_3$ 代入（1），则有

$$x_1=0$$

把$x_1=0$，$x_2=-x_3$ 代入（2），得

$$x_3^2=\frac{1}{2}$$

故

$$x_2=\frac{\sqrt{2}}{2},\quad x_3=-\frac{\sqrt{2}}{2}$$

于是，得

$$\begin{cases} C=\frac{2}{3} \\ x_1=0 \\ x_2=\frac{\sqrt{2}}{2} \\ x_3=-\frac{\sqrt{2}}{2} \end{cases}$$

所以，求积公式为

$$\int_{-1}^{1}f(x)dx\doteq\frac{2}{3}\left[f(0)+f\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)+f\left(-\frac{\sqrt{2}}{2}\right)\right]$$

4　解　（1）关于左矩形公式

$$\int_a^b f(x)dx\doteq(b-a)f(a)$$

对于$x\in[a,b]$，取$f(x)\doteq f(a)$，则有

$$\int_a^b f(x)dx\doteq\int_a^b f(a)dx=(b-a)f(a)$$

关于余项：

因为

$$\begin{aligned}R(f)&=\int_a^b f(x)dx-f(a)(b-a)\\&=\int_a^b f(x)dx-\int_a^b f(a)dx\\&=\int_a^b[f(x)-f(a)]dx\\&=\int_a^b f'(\xi)(x-a)dx\end{aligned}$$

又因为 $f'(\xi)$是在$[a,b]$上依赖于x的连续函数，$(x-a)$在$[a,b]$上不变号，所以，由积分中值定理，知，至少有一点$\eta\in(a,b)$，使

$$R(f)=\int_a^b f'(\xi)(x-a)dx$$
$$=f'(\eta)\int_a^b (x-a)dx$$
$$=\frac{1}{2}f'(\eta)(b-a)^2$$

即，左矩形求积公式的余项为

$$R(f)=\frac{1}{2}f'(\eta)(b-a)^2,\qquad \eta\in(a,b)$$

左矩形求积公式的几何解释为：用矩形$ABCD$的面积代替曲边梯形$ACEB$的面积，如图 4.

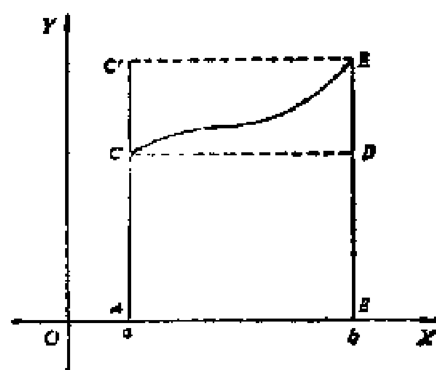


图 4

（2）关于右矩形公式 $\int_a^b f(x)dx\doteq(b-a)f(b)$. 对于任意的 $x\in[a,b]$，取 $f(x)=f(b)$，得

$$\int_a^b f(x)dx\doteq\int_a^b f(b)dx=(b-a)f(b)$$

仿左矩形公式的余项推导方法，可得其余项为

$$R(f)=-\frac{1}{2}f'(\eta)(b-a)^2,\quad \eta\in(a,b)$$

右矩形求积公式的几何解释为，用矩形$AC'EB$的面积代替曲边梯形$ACEB$的面积，如图 4.

5　证明　由内插求积公式（2.5）知

$$\int_a^b f(x)dx\doteq\sum_{k=0}^{n}A_k f(x_k)$$

的代数精确度，当插值节点个数为 $n+1$ 时($n\geqslant1$)，其公式具有n次代数精确度. 所以当 $f(x)=1$ 时，有

$$\int_a^b dx = \sum_{k=0}^{n} A_k$$

而上式的左边 $=b-a$。故有

$$A_0 + A_1 + A_2 + \cdots + A_n = b-a \quad \text{证完。}$$

习　题 5.3

1　解　由梯形公式得

$$\int_0^1 \frac{1}{1+x^2}dx \doteq \frac{1-0}{2}\left(\frac{1}{1+0^2}+\frac{1}{1+1^2}\right) \doteq 0.7500$$

由辛卜生公式得

$$\int_0^1 \frac{1}{1+x^2}dx \doteq \frac{1-0}{6}\left[\frac{1}{1+0^2}+4\cdot\frac{1}{1+\left(\frac{1}{2}\right)^2}+\frac{1}{1+1^2}\right]$$

$$\doteq 0.7833$$

2　解　（1）已知当 $n=3$ 时，牛顿—柯特斯公式为

$$\int_a^b f(x)dx \doteq (b-a)\sum_{k=0}^{3} C_k^{(3)} f(x_0+kh)$$

其中

$$C_k^{(3)} = \frac{(-1)^{3-k}}{3\cdot k!(3-k)!}\int_0^3 \frac{t(t-1)(t-2)(t-3)}{t-k}dt$$

$$(k=0,1,2,3)$$

于是，有

$$C_0^{(3)} = \frac{-1}{3\cdot 3!}\int_0^3 (t-1)(t-2)(t-3)dt = \frac{1}{8}$$

$$C_1^{(3)} = \frac{1}{3\cdot 1!\cdot 2!}\int_0^3 t(t-2)(t-3)dt = \frac{3}{8}$$

$$C_2^{(3)} = \frac{-1}{3\cdot 2!}\int_0^3 t(t-1)(t-3)dt = \frac{3}{8}$$

$$C_3^{(3)} = \frac{1}{3\cdot 3!}\int_0^3 t(t-1)(t-2)dt = \frac{1}{8}$$

故 $n=3$ 时的牛顿—柯特斯公式为

$$\int_a^b f(x)dx \doteq (b-a)\left[\frac{1}{8}f(a)+\frac{3}{8}f(a+h)+\right.$$
$$\left.+\frac{3}{8}f(a+2h)+\frac{1}{8}f(b)\right]$$

（2）下面求此公式的代数精确度.

因为在此公式中有四个节点，所以，由代数精确度定理知，此公式至少具有 3 次代数精确度. 当 $f(x)=x^4$ 时，有

$$\text{左边}=\int_a^b x^4 dx=\frac{1}{5}(b^5-a^5)$$

$$\text{右边}=\frac{b-a}{8}(a^4+3(a+h)^4+3(a+2h)^4+b^4)$$

进一步整理，知左边 ≠ 右边.

所以，该求积公式具有三次代数精确度.

（3）运用该求积公式计算 $\int_0^1 \frac{1}{1+x^2}dx$. 因为

$$f(x)=\frac{1}{1+x^2},\ x_0=0,\ x_1=\frac{1}{3},\ x_2=\frac{2}{3},\ x_3=1$$

所以，由上面所求牛顿—柯特斯公式，得

$$\int_0^1 \frac{1}{1+x^2}dx \doteq \frac{1}{8}f(0)+\frac{3}{8}f\left(\frac{1}{3}\right)+\frac{3}{8}f\left(\frac{3}{8}\right)+$$
$$+\frac{1}{8}f(1)=0.7846$$

实际上，

$$\int_0^1 \frac{1}{1+x^2}dx=\operatorname{arctg}x\Big|_0^1=0.7854$$

3 （1）球的体积公式：

解 设球的半径为 R，设球的中截面积为 $S_3(x)$ 则

$$S_3(x)=\pi R^2$$

而上底面积、下底面积均为零. 即

$$S_1(x)=0,\ S_2(x)=0$$

于是，由（3.12），得

$$V=\frac{2R}{6}[S_1(x)+4S_3(x)+S_2(x)]=\frac{4}{3}\pi R^3$$

（2）关于球台的体积公式：

解　设 r_1、r_2 为球台上、下底的半径，H 为球台的高，R 为球的半径，O 为球心，x 为圆心到球台下底的距离，见图5．由直角三角形三边关系，得

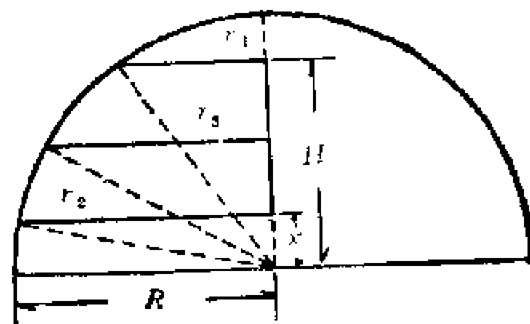


图　5

$$\begin{cases}R^2=r_1^2+(H+x)^2\\R^2=r_3^2+\left(\frac{H}{2}+x\right)^2\\R^2=r_2^2+x^2\end{cases}$$

即

$$\begin{cases}R^2=r_1^2+H^2+2xH+x^2\\R^2=r_3^2+\frac{H^2}{4}+xH+x^2\\R^2=r_2^2+x^2\end{cases}$$

解此方程组，得

$$r_3^2=\frac{1}{4}(2r_1^2+2r_2^2+H^2)$$

所以，球台的上、下、中截面积分别为

$$S_1(r_1)=\pi r_1^2$$

$$S_2(r_2)=\pi r_2^2$$

$$S_3(r_3)=\pi\cdot\frac{2r_2^2+2r_1^2+H^2}{4}$$

故，由（3.12）得球台体积公式为

$$V=\frac{H}{6}[S_1(r_1)+4S_3(r_3)+S_2(r_2)]$$

$$=\frac{H}{6}\pi[3(r_1^2+r_2^2)+H^2]$$

当 $H=r_2=R$，$r_1=0$ 时（半球），

$$V=\frac{2}{3}\pi R^3$$

习　题 5.4

1　解　（1）取 $h=\frac{1-0}{8}=0.1250$，根据（4.1）、（4.3），列表计算如下：

x_i	x_i^3	$\frac{1}{1+x_i^3}$	梯形公式	辛卜生公式
0.0000	0.0000	1.0000	1	1
0.1250	0.0020	0.9981	2	4
0.2500	0.0156	0.9846	2	2
0.3750	0.0527	0.9499	2	4
0.5000	0.1250	0.8889	2	2
0.6250	0.2441	0.8038	2	4
0.7500	0.4219	0.7033	2	2
0.8750	0.6699	0.5988	2	4
1.0000	1.0000	0.5000	1	1
Σ			13.3548	20.0560
I			0.8347	0.8357

所以，运用梯形公式，得

$$\int_0^1\frac{1}{1+x^3}dx\doteq 0.8347$$

运用辛卜生公式，得

$$\int_0^1\frac{1}{1+x^3}dx\doteq 0.8357$$

（2）取 $h=\frac{2-1}{6}\doteq 0.1667$，根据公式（4.1）、（4.3），

列表计算如下：

x_k	$\ln(x_k+1)$	$\dfrac{x_k}{\ln(1+x_k)}$	梯形公式	辛卜生公式
1.0000	0.6931	1.4428	1	1
1.1667	0.7732	1.5089	2	4
1.3334	0.8473	1.5737	2	2
1.5001	0.9163	1.6371	2	4
1.6667	0.9808	1.6993	2	2
1.8335	1.0415	1.7604	2	4
2.0000	1.0986	1.8205	1	1
Σ			19.6221	29.4349
I			1.6355	1.6360

所以，运用梯形公式，得

$$\int_1^2 \frac{x}{\ln(1+x)}dx \doteq 1.6355$$

运用辛卜生公式，得

$$\int_1^2 \frac{x}{\ln(1+x)}dx \doteq 1.6360$$

2　**证明**　设 $f(x)$ 在$[a,b]$上可积．由定积分定义知，对于区间$[a,b]$上的任意一个分割 T，设Δx_i为其分割后的任意一个小区间，取Δx_i中任意一点 ξ_i，所得到的积分和

$$\sum_{i=0}^{n-1} f(\xi_i)\Delta x_i$$

有

$$\lim_{\lambda(T)\to 0}\sum_{i=0}^{n-1} f(\xi_i)\,\Delta x_i = \int_a^b f(x)dx$$

其中　$\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$，　　$\lambda(T) = \max\limits_{1\leq i\leq n}\Delta x_i$．

（1）关于复化梯形公式：已知复化梯形公式为

$$\int_a^b f(x)dx \doteq \frac{b-a}{2n}\{f(x_0)+2[f(x_1)+\cdots+ f(x_{n-1})]+f(x_n)\}$$

上式右端可写成如下形式

$$\frac{1}{2}\left\{\frac{b-a}{n}[f(x_0)+f(x_1)+\cdots+f(x_{n-1})]+ \frac{b-a}{n}[f(x_1)+f(x_2)+\cdots+f(x_n)]\right\}$$

$$=\frac{1}{2}\left\{\sum_{i=0}^{n-1} f(x_i)\frac{(b-a)}{n}+\sum_{i=1}^{n} f(x_i)\frac{(b-a)}{n}\right\}$$

$$=\frac{1}{2}\left\{S_{n-1}+S_n\right\}$$

上式中的 S_{n-1}、S_n 是$f(x)$在$[a,b]$上的两个积分和。即把$[a,b]$分成 n 等份，在每一个小区间上取其左端点x_{i-1}作为ξ_i，即可得到积分和 S_{n-1}；取其右端点 x_i作为 ξ_i，即得到积分和 S_n。又因为当 $n\to\infty$时，$\lambda(T)=\frac{b-a}{n}\to 0$，所以，由定积分定义知

$$\int_a^b f(x)dx=\lim_{\lambda(T)\to 0}\frac{1}{2}(S_{n-1}+S_n)$$

$$=\lim_{n\to\infty}\frac{1}{2}(S_{n-1}+S_n)$$

$$=\frac{1}{2}\left(2\int_a^b f(x)dx\right)$$

$$=\int_a^b f(x)dx$$

证完。

（2）关于复化辛卜生公式：同理，可把已知的复化辛卜生公式

$$\int_a^b f(x)dx\doteq\frac{2h}{6}\{f(x_0)+4[f(x_1)+f(x_3)+\cdots+ f(x_{n-1})]+2[f(x_2)+f(x_4)+\cdots+ f(x_{n-2})]+f(x_n)\}$$

的右端可以写成

$$\frac{1}{6}\{(2h)[f(x_0)+f(x_2)+\cdots+f(x_{n-2})]+$$
$$+4\times(2h)[f(x_1)+f(x_3)+\cdots+f(x_{n-1})]+$$
$$+(2h)[f(x_2)+f(x_4)+\cdots+f(x_n)]\}$$
$$=\frac{1}{6}\{S_1+4S_2+S_3\}$$

由于S_1、S_2、S_3皆是相应于$[a,b]$的分割$[a,x_2]$，$[x_2,x_4]$，…，$[x_{n-2},b]$上的一个黎曼和，由积分定义知，当 $n\to\infty$时，有

$$\lim_{n\to\infty}S_1=\lim_{n\to\infty}2h\sum_{i=1}^{n/2}f(x_{2i-2})=\int_a^b f(x)dx$$
$$\lim_{n\to\infty}S_2=\lim_{n\to\infty}2h\sum_{i=1}^{n/2}f(x_{2i-1})=\int_a^b f(x)dx$$
$$\lim_{n\to\infty}S_3=\lim_{n\to\infty}2h\sum_{i=1}^{n/2}f(x_{2i})=\int_a^b f(x)dx$$

所以

$$\lim_{n\to\infty}S=\lim_{n\to\infty}\frac{1}{6}[S_1+4S_2+S_3]=\int_a^b f(x)dx$$ 证完。

3 解 运用复化辛卜生公式进行计算，因为$b-a=80$，$n=8$，故有

$$V(80)=\int_0^{80}f(x)dx$$
$$\doteq\frac{80}{3\times8}\{30.00+4[31.63+35.47+40.33+$$
$$+46.69]+2[33.44+37.75+43.29]+$$
$$+50.67\}=3087(m/sec)$$

4 解（1）导出求积公式。

令 $h=\frac{b-a}{n}$， $k=\frac{c-d}{m}$， $I(x)=\int_c^d f(x,y)dy$. 则由单积分的辛卜生公式，得

$$\int_a^b\int_c^d f(x,y)dxdy=\int_a^b I(x)dx$$
$$=\int_a^b\frac{k}{3}f(x,c)dx+\frac{4}{3}k\int_a^b f(x,\frac{c+d}{2})dx+$$

$$+\frac{k}{3}\int_a^b f(x,d)dx$$

$$=\frac{kh}{9}\Big\{f(a,c)+4f\Big(\frac{a+b}{2},c\Big)+f(b,c)+$$

$$+4\Big[f(a,\frac{c+d}{2})+4f\Big(\frac{a+b}{2},\ \frac{c+d}{2}\Big)+f(b,\frac{c+d}{2})\Big]+$$

$$+f(a,d)+4f\Big(\frac{d+b}{2},d\Big)+f(b,d)\Big\}+R$$

$$=\frac{kh}{9}\Big\{[f(a,c)+f(a,d)+f(b,c)+f(b,d)]+$$

$$+4\Big[f\Big(a,\frac{c+d}{2}\Big)+f\Big(\frac{a+b}{2},c\Big)+f\Big(b,\frac{c+d}{2}\Big)+$$

$$+f\Big(\frac{a+b}{2},d\Big)\Big]+16f\Big(\frac{a+b}{2},\ \frac{c+d}{2}\Big)\Big\}+R$$

其中

$$R=-\frac{kh}{45}\Big\{h^4\Big(\frac{\partial^4 f}{\partial x^4}\Big)_{(\xi,\eta)}+k^4\Big(\frac{\partial^4 f}{\partial y^4}\Big)_{(\bar{\xi},\bar{\eta})}\Big\}$$

公式中各节点的对应系数如图 6 所示：

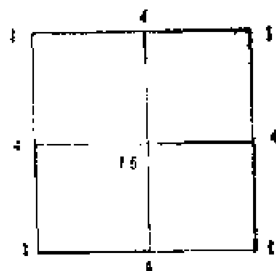


图 6

（2）利用上式计算积分

$$\int_1^2\int_{-1}^1(x^2+2y^2)dxdy$$

首先求出公式中的函数值如下表：

$f(x,y)$ （行：x，列：y）	-1	0	1
0	2	0	2
1	3	1	3
2	6	4	6

所以

$$I=\int_{0}^{2}\int_{-1}^{1}(x^2+2y^2)dxdy$$

$$=\frac{1}{9}[2\times1+6\times1+2\times1+6\times1+4\times0+4\times3+$$

$$+4\times4+3\times4+1\times16]=8$$

5 解 根据公式（4.1）、（4.7)、（4.3）、（4.10），列表计算如下：

K	区间等分数2^k	T 公 式	S 公 式
0	1	0.75000	
1	2	0.81944	1.00694
2	4	0.83170	0.83579
3	8	0.83416	0.83498
4	16	0.83540	0.83581
$\frac{1}{3}\lvert T_{2k}-T_k\rvert$		0.0004	
$\frac{1}{15}\lvert S_{2k}-S_k\rvert$			0.00005

所以，由梯形公式，得

$$I\doteq0.83540$$

由辛卜生公式，得

$$I\doteq0.83581$$

6 （1）计算 $I=\int_{0}^{1}\frac{\sin x}{x}dx$

解 取$n=8$，$x_k=x_0+k\cdot\frac{1}{8}$，根据公式（4.1）、（4.3）、习题 5.3—2题。列表计算如下：

x_k	$\sin x_k$	$\frac{\sin x_k}{x_k}$	梯形公式	辛卜生公式	柯特斯公式
0.0000	0.0000	1.0000	1	1	0.7
0.1250	0.1247	0.9974	2	4	3.2
0.2500	0.2474	0.9896	2	2	1.2

x_k	$\sin x_k$	$\frac{\sin x_k}{x_k}$	梯形公式	辛卜生公式	柯特斯公式
0.3750	0.3663	0.9767	2	4	3.2
0.5000	0.4794	0.9589	2	2	1.4
0.6250	0.5851	0.9362	2	4	3.2
0.7500	0.6816	0.9089	2	2	1.2
0.8750	0.7675	0.8772	2	4	3.2
1.0000	0.8415	0.8415	1	1	0.7
Σ			15.1311	22.7060	17.0295
I			0.9457	0.9461	0.9461

故

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx \doteq 0.9461$$

（2）$\int_0^1 e^{-x^2} dx$.

解　取 $n=10$，$x_k=x_0+\frac{k}{10}$，根据公式（4.1）、（4.3），列表计算如下：

n	x_i	$e^{-x_i^2}$	T 公　式	S 公　式
0	0.0	1.00000	1	1
1	0.1	0.99005	2	4
2	0.2	0.96079	2	2
3	0.3	0.91393	2	4
4	0.4	0.85214	2	2
5	0.5	0.77880	2	4
6	0.6	0.69768	2	2
7	0.7	0.61263	2	4
8	0.8	0.52729	2	2
9	0.9	0.44486	2	4
10	1.0	0.36788	1	1
	Σ		14.92422	22.40476
	I		0.746211	0.7468245

所以

$$I=\int_0^1 e^{-x^2}dx \doteq 0.746211 \quad \text{（梯形公式）}$$

$$I=\int_0^1 e^{-x^2}dx \doteq 0.7468245 \quad \text{（辛卜生公式）}$$

习　题　5.5

1　解　（1）由于　$f(x)=\dfrac{1}{1+x^2}$，$a=0$，$b=1$，

$f(0)=1$，$f(1)=\dfrac{1}{2}$，于是有

$$T_1=\frac{1}{2}[f(0)+f(1)]=\frac{1}{2}\left(1+\frac{1}{2}\right)=\frac{3}{4}=0.7500$$

（2）因为

$$f\left(\frac{1}{2}\right)=\frac{1}{1+\left(\frac{1}{2}\right)^2}=\frac{4}{5}$$

所以

$$T_2=\frac{1}{2}\left[T_1+f\left(\frac{1}{2}\right)\right]=\frac{31}{40}=0.7750$$

$$S_2=\frac{4}{3}T_2-\frac{1}{3}T_1=\frac{57}{60}=0.7833$$

（3）又因为

$$f\left(\frac{1}{4}\right)=\frac{1}{1+\left(\frac{1}{4}\right)^2}=\frac{16}{17},$$

$$f\left(\frac{3}{4}\right)=\frac{1}{1+\left(\frac{3}{4}\right)^2}=\frac{16}{25}$$

所以

$$T_4=\frac{1}{2}T_2+\frac{1}{4}\left[f\left(\frac{1}{4}\right)+f\left(\frac{3}{4}\right)\right]=0.7828$$

$$S_2^2=\frac{4T_4-T_2}{3}=0.7854$$

$$C_2^2 = \frac{16S_2^2 - S_2}{15} = 0.7855$$

（4）计算出 $f\left(\frac{1}{8}\right)$、$f\left(\frac{3}{8}\right)$、$f\left(\frac{5}{8}\right)$、$f\left(\frac{7}{8}\right)$，可得

$$T_8 = \frac{1}{2}T_4 + \frac{1}{8}\left[f\left(\frac{1}{8}\right) + f\left(\frac{3}{8}\right) + f\left(\frac{5}{8}\right) + f\left(\frac{7}{8}\right)\right]$$

$$= 0.7848$$

$$S_2^3 = \frac{4T_8 - T_4}{3} = 0.7855$$

$$C_2^3 = \frac{16S_2^3 - S_2}{15} = 0.7855$$

以上计算过程可列成下表：

K	区间等分数 2^k	T 公 式	S 公 式	C 公 式	R公式
0	$2^0=1$	0.7500			
1	$2^1=2$	0.7750	0.7833		
2	$2^2=4$	0.7828	0.7854	0.7855	
3	$2^3=8$	0.7848	0.7855	0.7855	

由于计算到C_2^3已经达到精度要求，所以，不必计算 R_2^k。故

$$\int_0^1 \frac{1}{1+x^2}dx \doteq 0.7855$$

2　$I = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^1 e^{-x^2}dx$。

解　首先求$\int_0^1 e^{-x^2}dx$的近似值。

因为$f(x)=e^{-x^2}$，$a=0$，$b=1$。根据公式(4.1)、(5.12)、(5.13)、(5.14)，列表计算如下：

K	区间等分数 2^k	T 公式	S 公式	C 公式	R 公式
0	$2^0=1$	0.68394			
1	$2^1=2$	0.73137	0.74718		
2	$2^2=4$	0.74299	0.74353	0.74328	
3	$2^3=8$	0.74587	0.74683	0.74705	0.74711
4	$2^4=16$	0.74635	0.74651	0.74649	0.74648

由于 $|R_{2^3}-R_{2^4}|<0.001$，所以

$$\int_0^1 e^{-x^2}dx \doteq 0.747$$

故

$$I=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^1 e^{-x^2}dx \doteq 0.843$$

习　　题 5.6

1 解　(1) $I=\int_{-2}^{2}\frac{1}{1+x^2}dx$　　取 $n=2$。

首先把区间$[-2,2]$变为$[-1,1]$，为此，令

$$x=\frac{b+a}{2}+\frac{b-a}{2}t=2t$$

则

$$dx=2dt$$

于是，得

$$\int_{-2}^{2}\frac{1}{1+x^2}dx=2\int_{-1}^{1}\frac{1}{1+4t^2}dt \doteq 2\sum_{k=1}^{3}A_k f(t_k)$$

$$=2[A_1f(t_1)+A_2f(t_2)+A_3f(t_3)]$$

$$=2\left[\frac{5}{9}\cdot\frac{1}{1+4\times(0.774597)^2}+\right.$$

$$+\frac{8}{9}\cdot\frac{1}{1+4\times 0^2}+\frac{5}{9}\cdot\frac{1}{1+4\times(0.774597)^2}\Big]$$

$$=2.4303$$

即

$$\int_{-2}^{2}\frac{1}{1+x^2}dx \doteq 2.4303$$

（2） $I=\int_0^1\frac{\mathrm{arctg}x}{x^{3/2}}dx$，　取$n=2$。

首先把区间变为〔-1,1〕。为此，令

$$x=\frac{1}{2}(1+t)$$

则有

$$dx=\frac{1}{2}dt$$

于是有

$$\int_0^1\frac{\mathrm{arctg}x}{x^{3/2}}dx=\frac{1}{2}\int_{-1}^{1}\frac{\mathrm{arctg}\left[\frac{1}{2}(1+t)\right]}{\left[\frac{1}{2}(1+t)\right]^{3/2}}dt$$

列表计算如下：

t_k	$\frac{1}{2}(1+t_k)$	$\frac{1}{2}(1+t_k)^{\frac{3}{2}}$	$\mathrm{arctg}[\frac{1}{2}(1+t_k)]$	$f(x_i)$	A_k	$A_kf(x_k)$
0.7746	0.8873	0.8358	0.7258	0.8684	0.5556	0.4825
0.0000	0.5000	0.6495	0.4637	0.7139	0.8889	0.6346
-0.7746	0.1127	0.0378	0.1122	2.9691	0.5556	1.6496
						$\Sigma=2.7662$

故

$$\int_0^1\frac{\mathrm{arctg}x}{x^{3/2}}dx \doteq \frac{1}{2}\Sigma=\frac{1}{2}\times 2.7662=1.3831$$

（3） $I=\int_0^1 \frac{\sqrt{x}}{(1+x)^2}dx$ 取$n=2$。

首先把区间〔0,1〕变成〔-1,1〕。为此，令

$$x=\frac{1}{2}(1+t)$$

则有

$$dx=\frac{1}{2}dt$$

于是有

$$I=\int_0^1 \frac{\sqrt{x}}{(1+x)^2}dx=\frac{1}{2}\int_{-1}^1 \frac{\sqrt{\frac{1}{2}(1+t)}}{\left[1+\frac{1}{2}(1+t)\right]^2}dt$$

$$=\sqrt{2}\int_{-1}^1 \frac{\sqrt{1+t}}{(3+t)^2}dt$$

列表计算如下：

t_k	$\sqrt{1+t_k}$	$\frac{1}{(3+t_k)^2}$	$f(t_k)$	A_k	$f(t_k)A_k$
0.7746	1.3321	0.0702	0.0935	0.5556	0.0519
0.0000	1.0000	0.1111	0.1111	0.8889	0.0988
-0.7746	0.4748	0.2019	0.0959	0.5556	0.0533
					$\Sigma=0.2040$

故

$$I=\int_0^1 \frac{\sqrt{x}}{(1+x)^2}dx \doteq \sqrt{2}\times 0.2040=0.2885$$

2　解　首先将区间〔0,1〕化为〔-1,1〕。令

$$x=\frac{1}{2}(1+t)$$

则

$$dx=\frac{1}{2}dt$$

于是，得

$$\int_{0}^{1}\sqrt{1+2x}\ dx=\frac{1}{2}\int_{-1}^{1}\sqrt{2+t}\ dt$$

对

$$\int_{-1}^{1}\sqrt{2+t}\ dt$$

应用高斯求积公式，列表计算如下（取$n=2$）：

t_k	$2+t_k$	$f(t_k)$	A_k	$A_k f(t_k)$
0.77460	2.77460	1.66571	0.55556	0.92540
0.00000	2.00000	1.41421	0.88889	1.25708
-0.77460	1.22540	1.10698	0.55556	0.61499
				$\frac{1}{2}\Sigma=1.39874$

由$\frac{1}{2}\Sigma=1.39874$知$m=0$。而原题要求积分近似值准确到$10^{-4}$，故有

$$m-p+1=-4$$

得

$$p=5$$

故

$$\int_{0}^{1}\sqrt{1+2x}\ dx\doteq 1.3987$$

3 解 首先将积分分为两部分

$$I=\int_{0}^{1}\frac{dx}{\sqrt{x}(1+x)}+\int_{1}^{\infty}\frac{dx}{\sqrt{x}(1+x)}$$

$$=I_1+I_2$$

其中

$$I_1=\int_{0}^{1}\frac{dx}{\sqrt{x}(1+x)},\quad I_2=\int_{1}^{\infty}\frac{dx}{\sqrt{x}(1+x)}$$

对于 I_2，令$x=t^{-1}$，则有$dx=-t^{-2}dt$，于是，有

$$I_2=-\int_{1}^{0}\frac{1}{t^2}\ \frac{dt}{(1+t^{-1})\sqrt{t^{-1}}}$$

$$=\int_0^1\frac{dt}{(1+t)\sqrt{t}}=\int_0^1\frac{dx}{(1+x)\sqrt{x}}$$

故

$$I=2I_1=2\int_0^1\frac{dx}{(1+x)\sqrt{x}}$$

$x=0$ 是 $\int_0^1\frac{dx}{(1+x)\sqrt{x}}$ 的奇点。运用分部积分法，得

$$\int_0^1\frac{dx}{(1+x)\sqrt{x}}=\frac{2\sqrt{x}}{1+x}\bigg|_0^1+2\int_0^1\frac{\sqrt{x}}{(1+x)^2}dx$$

$$=1+2\int_0^1\frac{\sqrt{x}}{(1+x)^2}dx$$

故

$$\int_0^\infty\frac{dx}{(1+x)\sqrt{x}}=2+4\int_0^1\frac{\sqrt{x}}{(1+x)^2}dx$$

为了运用高斯公式求解，把区间［0,1］变为［－1,1］。令 $x=\frac{1}{2}(1+t)$，则 $dx=\frac{1}{2}dt$，于是，有

$$\int_0^1\frac{\sqrt{x}}{(1+x)^2}dx=\frac{1}{2}\int_{-1}^1\frac{\sqrt{\frac{1}{2}(1+t)}}{\left(1+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}t\right)^2}dt$$

$$=\int_{-1}^1\frac{\sqrt{\frac{1+t}{2}}}{(3+t)}dt$$

利用五个节点的高斯求积公式，计算到第五位小数，得

$$\int_0^1\frac{\sqrt{x}}{(1+x)^2}dx\doteq 0.28607$$

于是

$$\int_0^\infty\frac{dx}{(1+x)\sqrt{x}}=2+4\times 0.28607=3.14427$$

4　证明　因为 n 个节点的高斯求积公式具有 $2n-1$ 次代数精确度，所以

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$$

对任何小于等于$2n-1$次的多项式$f(x)$都成立。对于$f(x)=1$，当然有

$$\int_{-1}^{1} dx = \sum_{k=1}^{n} A_k$$

而上式左端＝2，故

$$\sum_{k=1}^{n} A_k = 2 \qquad \text{证完。}$$

5 解 由所给条件可知，节点与系数共有 6 个未知参数，因此，其最高精确度为五次。为此，取

$$f(t) = t^k, \quad k = 0,1,2,3,4,5$$

因为

$$\int_{-1}^{1} dt = 2, \quad \int_{-1}^{1} t\,dt = 0, \quad \int_{-1}^{1} t^2 dt = \frac{2}{3}$$

$$\int_{-1}^{1} t^3 dt = 0, \quad \int_{-1}^{1} t^4 dt = \frac{2}{5}, \quad \int_{-1}^{1} t^5 dt = 0$$

故，把$f(x)=t^k \quad (k=0,1,2,3,4,5)$代入内插求积公式

$$\int_{-1}^{1} f(t)\,dt = B_1 f(1) + B_2 f(-1) + A_1 f(t_1) + A_2 f(t_2)$$

得下列方程组

$$\begin{cases} B_1 + B_2 - A_1 + A_2 = 2 & (1) \\ B_1 - B_2 + A_1 t_1 + A_2 t_2 = 0 & (2) \\ B_1 + B_2 + A_1 t_1^2 + A_2 t_2^2 = \dfrac{2}{3} & (3) \\ B_1 - B_2 + A_1 t_1^3 + A_2 t_2^3 = 0 & (4) \\ B_1 + B_2 + A_1 t_1^4 + A_2 t_2^4 = \dfrac{2}{5} & (5) \\ B_1 - B_2 + A_1 t_1^5 + A_2 t_2^5 = 0 & (6) \end{cases}$$

由（1）－（3）得 $A_1(1-t_1^2) + A_2(1-t_2^2) = \dfrac{4}{3}$ （7）

（3）－（5）得 $A_1(t_1^2 - t_1^4) + A_2(t_2^2 - t_2^4) = \dfrac{4}{15}$ （8）

（2）－（4）得 $A_1(t_1 - t_1^3) + A_2(t_2 - t_2^3) = 0$ （9）

（4）－（6）得 $A_1(t_1^3 - t_1^5) + A_2(t_2^3 - t_2^5) = 0$ （10）

由（9）与（10），得

$$\frac{A_1(t_1-t_1^3)}{A_1(t_1^3-t_1^5)}=\frac{A_2(t_2-t_2^3)}{A_2(t_2^3-t_2^5)}$$

则有

$$\frac{1}{t_1^2}=\frac{1}{t_2^2}$$

即

$$t_1=-t_2$$

将 $-t_1=t_2$ 代入（7）与（8），得

$$A_1(1-t_2^2)+A_2(1-t_2^2)=(1-t_2^2)(A_1+A_2)=\frac{4}{3} \tag{11}$$

$$A_1(t_2^2-t_2^4)+A_2(t_2^2-t_2^4)=(t_2^2-t_2^4)(A_1+A_2)=\frac{4}{15} \tag{12}$$

解（11）与（12），得

$$\frac{1}{t_2^2}=5$$

所以，有

$$t_2=\frac{1}{\sqrt{5}},\quad t_1=-\frac{1}{\sqrt{5}}$$

将 t_1、t_2代入（7）与（9），得

$$A_1\left(1-\frac{1}{5}\right)+A_2\left(1-\frac{1}{5}\right)=\frac{4}{3}$$

$$A_1\left(\frac{-1}{\sqrt{5}}+\frac{1}{5\sqrt{5}}\right)+A_2\left(\frac{1}{\sqrt{5}}-\frac{1}{5\sqrt{5}}\right)=0$$

即

$$\begin{cases}\left(1-\frac{1}{5}\right)(A_1+A_2)=\frac{4}{3}\\ \frac{1}{\sqrt{5}}\left(1-\frac{1}{5}\right)(A_2-A_1)=0\end{cases}$$

联立解之，得

$$2A_2 = \frac{5}{3}$$

所以

$$A_2 = \frac{5}{6}, \quad A_1 = \frac{5}{3} - A_2 = \frac{5}{6}$$

故

$$A_1 = A_2 = \frac{5}{6}$$

由（1）与（2）得

$$\begin{cases} B_1 + B_2 = \frac{1}{3} \\ B_1 - B_2 = 0 \end{cases}$$

所以

$$B_1 = B_2 = \frac{1}{6}$$

故

$$A_1 = A_2 = \frac{5}{6}, \quad B_1 = B_2 = \frac{1}{6}$$

$$t_1 = -\frac{1}{\sqrt{5}}, \quad t_2 = \frac{1}{\sqrt{5}}$$

第六章　常微分方程数值解法习题解答

习　题　6.2

1　解　将 $y(x)$在 $x=x_n$ 处泰勒展开

$$y(x_{n+1})=y(x_n)+hy'(x_n)+\frac{h^2}{2}y''(\xi_{n+1}),$$

$$x_n<\xi_{n+1}<x_{n+1}$$

略去$\frac{h^2}{2}y''(\xi_{n+1})$，注意 $y'(x_n)=f(x_n, y(x_n))$，并以 y_n，y_{n+1}分别代替 $y(x_n)$，$y(x_{n+1})$便得尤拉法公式

$$y_{n+1}=y_n+hf(x_n, y_n),\quad n=0,1,2\cdots$$

显然，局部截断误差为$\frac{h^2}{2}(\xi_{n+1})$。

2　解　于$[x_{n-1}, x_{n+1}]$上，积分方程两边，得

$$\int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}} y'(t)dt=\int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}} f(t,y(t))dt$$

即

$$y(x_{n+1})-y(x_{n-1})=\int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}} f(t,y(t))dt$$

利用中矩形公式计算上式右端积分，得

$$y(x_{n+1})-y(x_{n-1})=2hf(x_n,y(x_n))+R_{n+1}$$

舍去 R_{n+1}，就得中点折线法公式。

从中矩形公式的余项知，中点折线法的局部截断误差为

$$R_{n+1} = \frac{h^3}{3} y''(\eta_{n+1}), \quad x_{n-1} < \eta_{n+1} < x_{n+1}$$

3 **证明** 设$\varepsilon_{n+1}^{(m+1)} = y_{n+1} - y_{n+1}^{(m+1)}$，则迭代法(2.13)的误差方程为

$$\varepsilon_{n+1}^{(m+1)} = \frac{h}{2}[f(x_{n+1}, y_{n+1}) - f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(m)})]$$

因为

$$\left| \frac{\partial f}{\partial y} \right| \leqslant M$$

故

$$|f(x_{n+1}, y_{n+1}) - f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(m)})| \leqslant M|y_{n+1} - y_{n+1}^{(m)}|$$

从而

$$|\varepsilon_{n+1}^{(m+1)}| \leqslant \frac{Mh}{2} |\varepsilon^{(m)}|$$

反复利用上递推式，得

$$|\varepsilon_{n+1}^{(m+1)}| \leqslant \frac{Mh}{2} |\varepsilon^{(m)}| \leqslant \left(\frac{Mh}{2}\right)^2 |\varepsilon^{(m-1)}|$$

$$\leqslant \cdots \leqslant \left(\frac{Mh}{2}\right)^{m+1} |\varepsilon^{(0)}|$$

又因为

$$\frac{Mh}{2} < 1$$

故当 $m \to \infty$时，$|\varepsilon_{n+1}^{(m+1)}| \to 0$，即迭代程序(2.13)收敛。

4 **解** 将 $f(x, y) = x + y$代到尤拉法公式(2.7)，得

$$y_{n+1} = y_n + h(x_n + y_n)$$

$$= (1 + 0.05)y_n + 0.05x_n, \quad n = 0, 1$$

初值 $y(0) = 0$代到上式，得

$$y_1 = 0$$

又将$y_1 = 0$代到上式，得

$$y_2 = 0.005$$

为了用改进尤拉法解此题，我们把 $f(x, y) = x + y$ 代到迭代

程序(2.13)中，得

$$\begin{cases} y_{n+1}^{(0)} = y_n + 0.05(x_n + y_n) & (1) \\ y_{n+1}^{(m)} = y_n + 0.025[(x_n + y_n) + (x_{n+1}, y_{n+1}^{(m-1)})] & (2) \end{cases}$$

现在求y_1，由(1)求得 $y_1^{(0)} = 0$，将它代入(2)中进行迭代，便有

$$y_1^{(1)} = y_2^{(2)} = 0.0013$$

是所求的结果。同理，

$$y_2^{(0)} = 0.005$$

而 $$y_2^{(1)} = y_2^{(2)} = 0.0052$$

故

$$y_2 = 0.0052$$

不难算出真解 $y = e^x - (x+1)$，从而

$$y(0.05) = 0.0013$$

$$y(0.1) = 0.0052$$

比较这三组值可看出，改进尤拉法比尤拉法更精确。

习　　题　6.3

1　证明　设 $\varepsilon_n = y(x_n) - \tilde{y}_n$，则从 $y(x_{n+1}) = y(x_n) + $

$$+ \frac{h}{2}[f(x_n, y(x_n)) + f(x_{n+1}, y(x_{n+1}))] + R_{n+1}^{(1)}$$

减去

$$\tilde{y}_{n+1} = \tilde{y}_n + \frac{h}{2}[f(x_n, \tilde{y}_n) + f(x_{n+1}, \tilde{y}_{n+1})]$$

得

$$\varepsilon_{n+1} = \varepsilon_n + \frac{h}{2}[f(x_n, y(x_n)) - f(x_n, \tilde{y}_n)$$

$$+ f(x_{n+1}, y(x_{n+1})) - f(x_{n+1}, \tilde{y}_{n+1})] + R_{n+1}^{(1)}$$

利用李普希兹条件及 $|R_{n+1}| \leqslant \frac{h^3}{12} M_3$，有

$$|\varepsilon_{n+1}| \leqslant |\varepsilon_n| + \frac{Lh}{2}|\varepsilon_n| + \frac{hL}{2}|\varepsilon_{n+1}| + \frac{h^3}{12}M_3$$

即

$$|\varepsilon_{n+1}| \leqslant \left(\frac{2+Lh}{2-Lh}\right)|\varepsilon_n| + \frac{M_3h^3}{6(2-Lh)}$$

反复利用上递推关系，得

$$|\varepsilon_n| \leqslant \left(\frac{2+Lh}{2-Lh}\right)|\varepsilon_{n-1}| + \frac{M_3h^3}{6(2-Lh)}$$

$$\leqslant \left(\frac{2+Lh}{2-Lh}\right)^2|\varepsilon_{n-2}| + \frac{M_3h^3}{6(2-Lh)} + \frac{M_3h^3}{6(2-Lh)}\left(\frac{2+Lh}{2-Lh}\right)$$

$$\cdots\cdots$$

$$\leqslant \left(\frac{2+Lh}{2-Lh}\right)^n|\varepsilon_0| + \frac{M_3h^3}{6(2-Lh)}\sum_{i=0}^{n-1}\left(\frac{2+Lh}{2-Lh}\right)^i$$

$$= \left(\frac{2+Lh}{2-Lh}\right)^n|\varepsilon_0| + \frac{M_3h^3}{6(2-Lh)} \cdot \frac{2-Lh}{2Lh}\left[\left(\frac{2+Lh}{2-Lh}\right)^n - 1\right]$$

$$= \left(\frac{2+Lh}{2-Lh}\right)^n|\varepsilon_0| + \frac{M_3h^2}{12L}\left[\left(\frac{2+Lh}{2-Lh}\right)^n - 1\right]$$

但 $h = \frac{b-a}{N}$，且 $x_n = a + nh \leqslant b$，从而当 $h < \frac{1}{L}$ 时，

$$\left(\frac{2+Lh}{2-Lh}\right)^n \leqslant (1+2Lh)^N \leqslant e^{2L(b-a)}$$

故

$$|\varepsilon_n| \leqslant e^{2L(b-a)}|\varepsilon_0| + \frac{M_3h^2}{12L}(e^{2L(b-a)} - 1) \qquad \text{证毕}$$

2 证明 将 $f(x,y) = -y$ 代入改进尤拉法公式 (2.11)

中，得

$$y_n = y_{n-1} - \frac{h}{2}(y_{n-1} + y_n)$$

经整理

$$y_n = \frac{2-h}{2+h} y_{n-1}$$

从而

$$y_n = \frac{2-h}{2+h} y_{n-1} = \left(\frac{2-h}{2+h}\right)^2 y_{n-2} = \cdots\cdots$$

$$= \left(\frac{2-h}{2+h}\right)^n y_0$$

但 $y_0 = 1$，故

$$y_n = \left(\frac{2-h}{2+h}\right)^n$$

下面我们证明，当 $h \to 0$ 时，它收敛于精确解 e^{-x}。为此，须计算下列极限：

$$\lim_{h \to 0}\left(\frac{2-h}{2+h}\right)^n = \lim_{h \to 0}\left(1 - \frac{2h}{2+h}\right)^{\frac{x}{h}}$$

$$= \lim_{h \to 0} \frac{1}{\left(1 - \frac{2h}{2+h}\right)^{-\frac{x}{h}}}$$

$$= \lim_{h \to 0}\left(\frac{1}{\left(1 - \frac{2h}{2+h}\right)^{-(\frac{1}{h}+\frac{1}{2})-\frac{1}{2}}}\right)$$

$$= \lim_{h \to 0} \frac{1}{\left[\left(1 - \frac{2h}{2+h}\right)^{-\frac{2+h}{2h}} \left(1 - \frac{2h}{2+h}\right)^{\frac{1}{2}}\right]^x}$$

$$= \frac{1}{e^x}$$

$$= e^{-x}$$

这就证明了当 $h \to 0$ 时，数值解收敛于精确解。证毕。

3　解　我们以$\widetilde{y_n}$表示改进尤拉法(2.11)的真解，而其数值解记为y_n，并令$e_n=\widetilde{y_n}-y_n$。将用改进尤拉法(2.11)解模型问题（3.7），便得

$$\widetilde{y}_{n+1}=\widetilde{y_n}+\frac{h}{2}(A\widetilde{y_n}+A\widetilde{y}_{n+1})$$

及

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{2}(Ay_n+Ay_{n+1})$$

两式相减，有

$$e_{n+1}=e_n+\frac{Ah}{2}e_n+\frac{Ah}{2}e_{n+1}$$

即

$$e_{n+1}=\frac{1+\frac{Ah}{2}}{1-\frac{Ah}{2}}e_n$$

亦即

$$|e_{n+1}|=\left|\frac{2+hA}{2-hA}\right||e_n|$$

当$Re(A)<0$时，有

$$\left|\frac{2+hA}{2-hA}\right|<1$$

从而　$|e_{n+1}|\leqslant|e_n|$

所以，改进尤拉法（2.11）的绝对稳定域是hA复平面的整个左半平面。

习　题　6.4

1　解　据题意

$$f(x,y)=x+y,\quad h=0.1$$

由（4.12）得

$$\begin{cases} k_1 = x_n + y_n \\ k_2 = x_n + 0.05 + y_n + 0.05k_1 \\ k_3 = x_n + 0.05 + y_n + 0.05k_2 \\ k_4 = x_n + 0.1 + y_n + 0.1k_3 \end{cases}$$

将初始条件 $x_0 = 0, y(0) = 0$代入上式，并依次计算 $k_i(i = 1, 2, 3, 4)$得

$$k_1 = 0,\ k_2 = 0.05,\ k_3 = 0.0525,\ k_4 = 0.1053$$

再把这些 k_i 值代入(4.12)，有

$$y_1 = 0 + \frac{0.1}{6}(0 + 2 \times 0.05 + 2 \times 0.0525 + 0.1053)$$

$$= 0.0052$$

再将 $x_1 = 0.1$，$y_1 = 0.0052$代入 k_i 的表达式，得

$$k_1 = 0.1052,\ k_2 = 0.1605,\ k_3 = 0.1632,\ k_4 = 0.2215,$$

于是

$$y_2 = 0.0052 + \frac{0.1}{6}(0.1052 + 2 \times 0.1605 + 2 \times 0.1632$$

$$+ 0.2215) = 0.0214$$

本题的精确解为 $y = e^x - (x + 1)$（见习题6.2第4题），从而

$$y(0.1) \doteq 0.0052,\ y(0.2) \doteq 0.0214$$

2 解 根据题意知，$f(x, y) = x^2 + x^3y \quad h = 0.1$，由(4.12)，有

$$\begin{cases} k_1 = x_n^2 + x_n^3 y_n \\ k_2 = (x_n + 0.05)^2 + (x_n + 0.05)^3(y_n + 0.05k_1) \\ k_3 = (x_n + 0.05)^2 + (x_n + 0.05)^3(y_n + 0.05k_2) \\ k_4 = (x_n + 0.1)^2 + (x_n + 0.1)^3(y_n + 0.1k_3) \end{cases}$$

将初始条件$x_0 = 1$，$y_0 = 1$代入上式，并依次计算 $k_i(i = 1, 2, 3, 4)$得

$$k_1 = 2,\ k_2 = 2.3759,\ k_3 = 2.3976,\ k_4 = 2.5376$$

代入(4.12)，有

$$y_1 = 1 + \frac{0.1}{6}(2 + 2\times 2.3759 + 2\times 2.3976 + 2.5376)$$

$$= 1.2347$$

重复上述计算步骤可得：

$$y_2 = 1.5810,\quad y_3 = 2.0955$$

3 解 将 $x_1=0.1$，$y_1=0.90516$，代入(4.14)中，并依次计算k_i，得

$$k_1 = -0.89516,\ k_2 = -0.83790,\ k_3 = -0.84077,$$

$$k_4 = -0.80109$$

将这些 k_i 的值代入(4.12)，得

$$y_2 = 0.90516 + \frac{0.1}{6}[-0.89516 + 2\times(-0.83790) + $$

$$+2\times(-0.84077) - 0.80109]$$

$$= 0.82093$$

再把 $x_2=0.2$，$y_2=0.82093$代入（4.14）中，并计算出k_i，得

$$k_1 = -0.78093,\ k_2 = -0.71939,\ k_3 = -0.72246,$$

$$k_4 = -0.65868$$

因此

$$y_3 = 0.82093 + \frac{0.1}{6}[-0.78093 + 2\times(-0.71939) + $$

$$+2\times(-0.72246) - 0.65868]$$

$$= 0.74887$$

习　题 6.5

1 解 首先，用四阶龙格——库塔法计算出 y_1，y_2，为此，将

$$f(x, y) = 2x - y,\ h = 0.1,\quad y_0 = 3$$

代到(4.12)，依次计算得

$$y_1 = 2.9145,\ y_2 = 2.8562$$

从而

$$f_0 = -1,\ f_1 = -0.7145,\ f_2 = -0.4562$$

再将这些值代入(5.13)，得

$$y_3 = 2.8562 + \frac{0.1}{12}[23\times(-0.4562) - 16\times(-0.7145) + 5\times(-1)]$$

$$= 2.8224$$

从而

$$f_3 = -0.2224$$

再由（5.14），得

$$y_4 = 2.8224 + \frac{0.1}{24}[55\times(-0.224) - 59\times(-0.4562) + 37\times(-0.7145) - 9\times(-1)]$$

$$= 2.8109$$

2　解　由阿达姆斯内插法迭代程序(5.22)知，只要我们适当选取 h，使之满足

$$\left|\frac{dF(y_{n+1})}{dy_{n+1}}\right| = \frac{3}{8}h\left|\frac{\partial f(x_{n+1}, y_{n+1})}{\partial y_{n+1}}\right| < 1$$

即可．因为

$$f(x, y) = -y(1+xy)$$

故

$$\frac{\partial f(x, y)}{\partial y} = -1 - 2xy$$

即

$$\frac{\partial f(x_{n+1} y_{n+1})}{\partial y_{n+1}} = -1 - 2x_{n+1}y_{n+1}$$

因此，

$$h < \frac{8}{3|1 + 2x_{n+1}y_{n+1}|}$$

但上不等式中含有 y_{n+1}，我们仍不能获得步长 h 的适当值。因而，有必要估计 y_{n+1}的值。为此，对较大步长 $\overline{h}$ 用简单方法（如尤拉法）计算出 $y_{n+1}(n=0, 1, \cdots, N-1)$。如取 $\overline{h}=0.5$，则由尤拉法公式，得

$$
\begin{aligned}
y_1 &= y_0 + \overline{h}[-y_0(1+x_0y_0)] \\
&= 1+0.5\times[-1\times(1+0)]=0.5 \\
y_2 &= 0.5+0.5\times[-0.5(1+1\times 0.5)] \\
&= 0.125
\end{aligned}
$$

从而

$$h<\frac{8}{3|1+2\times 0.5\times 0.5|}=\frac{8}{3\times 1.5}$$

显然，在 $0\leqslant x\leqslant 1$上不管取多大步长，迭代法收敛。

习　　题　6.6

1　解　根据题意知，积分区间为$[0, 1]$，$h=0.2$。因此，共有六个节点，即

$$x_0=0,\ x_1=0.2,\ x_2=0.4,\ x_3=0.6,\ x_4=0.8,\ x_5=1$$

仿（6.4)在内点列差分方程，并加上边值条件，得

$$
\begin{cases}
\dfrac{y_{i-1}-2y_i+y_{i+1}}{h^2}-y_i=0 \\
y_0=0, \quad y_5=1, \quad i=1,2,3,4
\end{cases}
$$

即

$$
\begin{cases}
y_{i-1}-(2+h^2)y_i+y_{i+1}=0 \\
y_0=0, \quad y_5=1, \quad i=1,2,3,4
\end{cases}
$$

按（6.9），此处 $a_i=c_i=1>0$，$b=-(2+h^2)$。如果取 $\rho_i=h^2>0$，便有 $-b_i\geqslant a_i+c_i+\rho_i$。即满足定理中（6.8）的诸条件，故上述差分方程存在唯一解且收敛于原方程。

在每个内点列方程得

$$\begin{cases} -2.04y_1+y_2=0 \\ y_1-2.04y_2+y_3=0 \\ y_2-2.04y_3+y_4=0 \\ y_3-2.04y_4=-1 \end{cases}$$

由追赶法公式（5.7），计算中间变量得

$$\eta_1=0,\ \eta_2=0,\ \eta_3=0,\ \eta_4=-1$$

又由追赶法公式(5.8)，得

$$y_4=0.7558,\ y_3=0.5418,\ y_2=0.3496,\ y_1=0.1714$$

2 **解** 由题意知，积分区间为$[-1,1]$，步长为 $h=0.5$. 因而，共有五个节点，即

$$x_0=-1,\ x_1=-0.5,\ x_2=0,\ x_3=0.5,\ x_4=1$$

按（6.4)写出差分方程

$$\begin{cases} \dfrac{y_{i-1}-2y_i+y_{i+1}}{h^2}-(1+x_i^2)y_i=-1 \\ y_0=y_4=0 \qquad i=1,2,3 \end{cases}$$

经整理，得

$$\begin{cases} y_{i-1}-(2+h^2+h^2x_i^2)y_i+y_{i+1}=-h^2 \\ y_0=y_4=0 \qquad i=1,2,3 \end{cases}$$

将上述方程按（6.9）写成一般二阶差分方程形式，此时 $a_i=c_i=1$，$b_i=-(2+h^2+h^2x_i^2)$. 只要取 $\rho_i=h^2+h^2x_i^2>0$，便知满足定理条件中（6.8)诸条件. 由此得知，该差分方程存在唯一解且收敛于原方程.

为了算出数值结果，在每内点上列出方程，得

$$\begin{aligned} -2.3125y_1+y_2 &= -0.25 \\ y_1-2.3125y_2+y_3 &= -0.25 \\ y_2-2.3125y_3 &= -0.25 \end{aligned}$$

由追赶法递推式（5.7)，计算中间变量得

$$\eta_1=-0.25,\ \eta_2=-0.3581,\ \eta_3=-0.4405$$

又由追赶法公式(5.8)得

$$y_3=0.2474,\ y_2=0.3221,\ y_1=0.2474$$

第七章　编微分方程数值解法习题解答

习　题　7.1

1　**解**　用迭代法求解，先选初始近似，由迭代形式 $u_{ik}=\frac{1}{4}(u_{i+1,k}+u_{i-1,k}+u_{i,k+1}+u_{i,k-1})$根据给定的边界条件，则有：

$$u_{21}^0=\frac{1}{4}(21.0+0+17.0+12.1)=12.5$$

$$u_{11}^0=\frac{1}{4}(12.5+0+12.1+0)=6.2$$

$$u_{31}^0=\frac{1}{4}(12.5+9.0+21.0+12.1)=13.7$$

$$u_{13}^0=\frac{1}{4}(12.5+0+17.0+0)=7.4$$

$$u_{33}^0=\frac{1}{4}(12.5+17.0+18.6+21.0)=17.3$$

$$u_{21}^0=\frac{1}{4}(12.1+6.2+13.7+12.5)=11.1$$

$$u_{12}^0=\frac{1}{4}(0+12.5+6.2+7.4)=6.5$$

$$u_{32}^0=\frac{1}{4}(17.3+13.7+21.0+12.5)=16.1$$

$$u_{23}^0=\frac{1}{4}(12.5+17.0+7.4+17.3)=13.6$$

然后用采德尔迭代程序列表计算如下：

n	u_{11}^n	u_{21}^n	u_{31}^n	u_{12}^n	u_{22}^n	u_{32}^n	u_{13}^n	u_{23}^n	u_{33}^n
0	6.2	11.1	13.7	6.5	12.5	16.1	7.4	13.6	17.3
1	6.4	11.2	14.3	6.3	11.8	16.1	7.8	13.5	17.6
2	6.3	11.1	14.3	6.3	11.8	16.2	7.8	13.6	17.7
3	6.3	11.1	14.3	6.3	11.8	16.2	7.8	13.6	17.7

2　**解**　由所给的网域和边界条件，代入差分方程

$$u_{i,k}=\frac{1}{4}(u_{i-1,k}+u_{i+1,k}+u_{i,k+1}+u_{i,k-1})$$

便得下方程组

$$\begin{cases} u_{11}=\frac{1}{4}(u_{21}+u_{12}+12) \\ u_{21}=\frac{1}{4}(u_{11}+u_{22}+4) \\ u_{12}=\frac{1}{4}(u_{11}+u_{22}+4) \\ u_{22}=\frac{1}{4}(u_{12}+u_{21}+4) \end{cases}$$

因为 $u_{12}=u_{21}$，所以求下列方程组即可

$$\begin{cases} u_{11}=\frac{1}{2}u_{12}+3 \\ u_{12}=\frac{1}{4}u_{11}+\frac{1}{4}u_{22}+1 \\ u_{22}=\frac{1}{2}u_{12}+1 \end{cases}$$

写成矩阵的形式，即为

$$x=Ax+b$$

$$\begin{pmatrix} u_{11} \\ u_{12} \\ u_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{4} \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} \\ u_{12} \\ u_{22} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

取 $x_0=(3,1,1)^T$，用简单迭代法求解。

习　　题　7.2

1　解　首先作两族平行于坐标轴的直线

$x_i=x_0+ih$

$y_j=y_0+j\tau$

将区域 Ω 分割成矩形网格。

利用泰勒公式得到

$$\frac{u(x_i+h,y_j)-u(x_i-h,y_j)}{2h}$$

$$=u_x(x_i,y_j)+\frac{h^2}{12}\{u_{x^3}(x_i+\theta_1 h,y_j)+u_{x^3}(x_i-\theta_2 h,y_j)\} \qquad (1)$$

$$\frac{u(x_i+h,y_j)-2u(x_i,y_j)+u(x_i-h,y_j)}{h^2}$$

$$=u_{xx}(x_i,y_j)+\frac{h^2}{4!}\{u_{x^4}(x_i+\theta_3 h,y_j)+u_{x^4}(x_i-\theta_4 h,y_j)\} \qquad (2)$$

同理

$$\frac{u(x_i,y_j+\tau)-u(x_i,y_j-\tau)}{2\tau}$$

$$=u_y(x_i,y_j)+\frac{\tau^2}{12}\{u_{y^3}(x_i,y_j+\theta_5\tau)$$

$$+u_{y3}(x_i, y_j-\theta_6\tau))\} \tag{3}$$

$$\frac{u(x_i, y_j+\tau)-2u(x_i, y_j)+u(x_i, y_j-\tau)}{\tau^2}$$

$$=u_{yy}(x_i, y_j)+\frac{\tau^2}{4!}\{u_{y4}(x_i, y_j+\theta_7\tau)$$

$$+u_{y4}(x_i, y_j-\theta_8\tau)\} \tag{4}$$

其中

$$0\leqslant\theta_i\leqslant 1 \qquad i=1, 2, \cdots, 8$$

设

$$a_{ij}=a(x_i, y_j),\ b_{ij}=b(x_i, y_j),\ c_{ij}=c(x_i, y_j)$$

$$d_{ij}=d(x_i, y_j),\ g_{ij}=g(x_i, y_j), f_{ij}=f(x_i, y_j)$$

则

$$L_{h\tau}u(x_i, y_j)=a_{ij}\frac{u(x_i+h, y_j)-2u(x_i, y_j)+u(x_i-h, y_j)}{h^2}$$

$$+b_{ij}\frac{u(x_i, y_j+\tau)-2u(x_i, y_j)+u(x_i, y_j-\tau)}{\tau^2}$$

$$+c_{ij}\frac{u(x_i+h, y_j)-u(x_i-h, y_j)}{2h}$$

$$+d_{ij}\frac{u(x_i, y_j+\tau)-u(x_i, y_j-\tau)}{2\tau}$$

$$+g_{ij}u(x_i, y_j)=(Lu)_{ij}+R_{h\tau} \tag{5}$$

其中

$$R_{h\tau}=\frac{a_{ij}h^2}{24}u_{x^4}\{(x_i+\theta_3h, y_j)+u_{x^4}(x_i-\theta_4h, y_j)\}$$

$$+\frac{b_{ij}\tau^2}{24}\{u_{y^4}(x_i, y_j+\theta_5\tau)+u_{y^4}(x_i, y_j-\theta_6\tau)\}$$

$$+\frac{c_{ij}h^2}{12}\{u_{x^3}(x_i+\theta_1h, y_j)+u_{x^3}(x_i-\theta_2h, y_j)\}$$

$$+\frac{d_{ij}\tau^2}{12}\{u_{y^3}(x_i, y_j+\theta_3\tau)$$

$$+u_{y^3}(x_i, y_j-\theta_4\tau)\} \tag{6}$$

如果 u 的三、四阶导数均为有界，并假定

$$M_3 = \max_{\Omega}\left\{\left|\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right|, \ \left|\frac{\partial^3 u}{\partial y^3}\right|\right\},$$

$$M_4 = \max_{\Omega}\left\{\left|\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right|, \ \left|\frac{\partial^4 u}{2y^4}\right|\right\}$$

$$\alpha = \frac{\tau}{h} = \text{const}$$

则当 $h\to 0$, $\tau\to 0$ 时

$$|R_{h\tau}| \leqslant \frac{h^2}{12}\{(|a_{ij}| + \alpha^2|b_{ij}|)M_4 + 2(|c_{ij}| + \alpha^2|d_{ij}|M_3\} = O(h^2) \tag{7}$$

若 $u=u(x,y)$是偏微分方程的解，则有

$$L_{h,\tau}u(x_i, y_j) = f_{ij} + R_{h\tau} \tag{8}$$

设 u_{ij} 是 $u(x_i, y_j)$ 的近似解,在上式中略去 $R_{h\tau}$ 则得到相应的差分方程

$$L_{h\tau}u_{ij} = f_{ij} \tag{9}$$

即

$$a_{ij}\frac{u_{i+1,j} - 2u_{ij} + u_{i-1,j}}{h^2} + b_{ij}\frac{u_{i,j+1} - 2u_{ij} + u_{i,j-1}}{\tau^2} + c_{ij}\frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2h} + d_{ij}\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{2\tau} + g_{ij}u_{ij} = f_{i,j} \tag{10}$$

合并同类项，可改写差分方程组为以下形式：

$$A_{ij}u_{i+1,j} + B_{ij}u_{i-1,j} + C_{ij,i,j+1} + D_{ij}u_{i,j-1} - E_{ij}u_{ij} = f_{ij} \tag{11}$$

其中

$$
\begin{cases}
A_{ij} = \dfrac{a_{ij}}{h^2} + \dfrac{c_{ij}}{2h}, & B_{ij} = \dfrac{a_{ij}}{h^2} - \dfrac{c_{ij}}{2h} \\
C_{ij} = \dfrac{b_{ij}}{\tau^2} + \dfrac{d_{ij}}{2\tau}, & D_{ij} = \dfrac{b_{ij}}{\tau^2} - \dfrac{d_{ij}}{2\tau} \\
E_{ij} = \dfrac{2a_{ij}}{h^2} + \dfrac{2b_{ij}}{\tau^2} - g_{ij}
\end{cases}
$$

由(11)得

$$u_{ij} = \frac{1}{E_{ij}}(A_{ij}u_{i-1,j} + B_{ij}u_{i-1,j} + C_{ij}u_{i,j-1} + D_{ij}u_{i,j-1} - f_{ij}) \tag{12}$$

显然(12)是五点差分格式。

2 **解** 在构造微分方程的差分方程时，我们仅限于讨论步长为h的正方形网格，最简单情况。取定某一网格节点，如图7所示，我们把它记为$(ih,\ jh)$。除了点(ih, jh)外，我们还考虑与它最近的12个点，在图上用大黑点来标记。作12点函数值与点(ih, jh)上的函数值之差，由于对称性，我们不取这些差本身，而取下列的和：

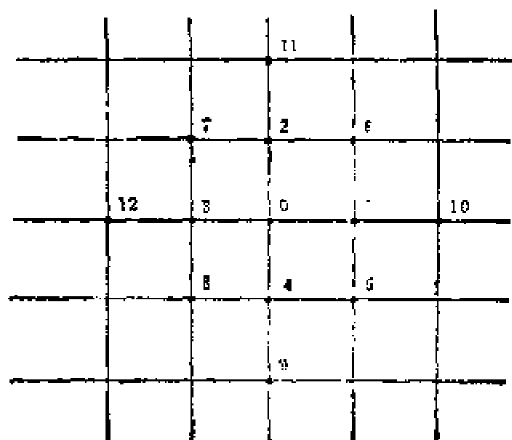


图7

$$\Diamond u_0 = u_1 + u_2 + u_3 + u_4 - 4u_0$$

$$\square u_0 = u_5 + u_6 + u_7 + u_8 - 4u_0$$

$$\Diamond^* u_0 = u_9 + u_{10} + u_{11} + u_{12} - 4u_0$$

利用台劳公式把每一个差，按h在0点展开，并把它们代入上面各式。$\Diamond u_0$与$\square u_0$的形式是

$$\Diamond u_0 = 2\Big[\frac{h^2}{2!}(u_{x^2} + u_{y^2}) + \frac{h^4}{4!}(u_{x^4} + u_{y^4})$$

$$+\frac{h^6}{6!}(u_{x^6}+u_{y^6})+\cdots\Big]$$

$$\Box u_0=4\Big[\frac{h^2}{2!}(u_{x^2}+u_{y^2})+\frac{h^4}{4!}(u_{x^4}+6u_{x^2y^2}$$

$$+u_{y^4})+\frac{h^6}{6!}u_{x^6}+15u_{x^4y^2}+15u_{x^2y^4}+u_{y^6})+\cdots\Big]$$

然后作这些式子的线性组合

$$C_1\Diamond u_0+C_2\Box u_0+C_3\Diamond^* u_0$$

它们的系数选取：使其具有二阶导数 u_{x^2}， u_{y^2} 的项消去，具有四阶导数的项形成 $u_{x^4}+2u_{x^2y^2}+u_{y^4}$

为此，C_1，C_2，C_3，应满足下列方程组

$$\begin{cases} 2\dfrac{h^2}{2!}C_1+4\dfrac{h^2}{4!}C_2+2\dfrac{4h^2}{2!}C_3=0 \\ 2\dfrac{h^4}{4!}C_1+4\dfrac{h^4}{4!}C_2+2\dfrac{16h^4}{4!}C_3=1 \\ 4\dfrac{h^4}{4!}6C_2=2 \end{cases}$$

解此方程组，我们得到

$$C_1=-\frac{8}{h^4},\quad C_2=\frac{2}{h^4},\quad C_3=\frac{1}{h^4}$$

把 C_1，C_2，C_3 代入所考虑的组合式中，可得下列等式

$$\frac{1}{h^4}[20u_0-8(u_1+u_2+u_3+u_4)+2(u_5+u_6+u_7+u_8)$$

$$+(u_9+u_{10}+u_{11}+u_{12})]=\Delta^2u+R_0$$

其中

$$R_0=\frac{h^2}{6}(u_{x^6}+u_{x^4y^2}+u_{x^2y^4}+u_{y^6})+\cdots$$

如果略去 R_0，我们就得到微分方程的差分方程：

$$\frac{1}{h^4}[20u_0-8(u_1+u_2+u_3+u_4)+2(u_5+u_6+u_7+u_8)+$$

$$+(u_9+u_{10}+u_{11}+u_{12})]=f_0$$

误差阶为 $O(h^2)$。

3　解　此问题的差分方程为

$$u_{i+1,j}+u_{i-1,j}+u_{i,j+1}+u_{i,j-1}-4u_{ij}=0$$

$$u_{01}=u_{02}=2$$

$$u_{10}=\sin\frac{\pi}{4}=0.7071$$

$$u_{20}=\sin\frac{\pi}{4}=1$$

$$u_{30}=\sin\frac{3\pi}{4}=0.7071$$

$$u_{03}=u_{13}=u_{23}=u_{33}=u_{40}=u_{41}=u_{42}=u_{43}=u_{00}=0$$

节点分布如下图，其中 $u_i(i=1,2,\cdots,6)$为待求节点。

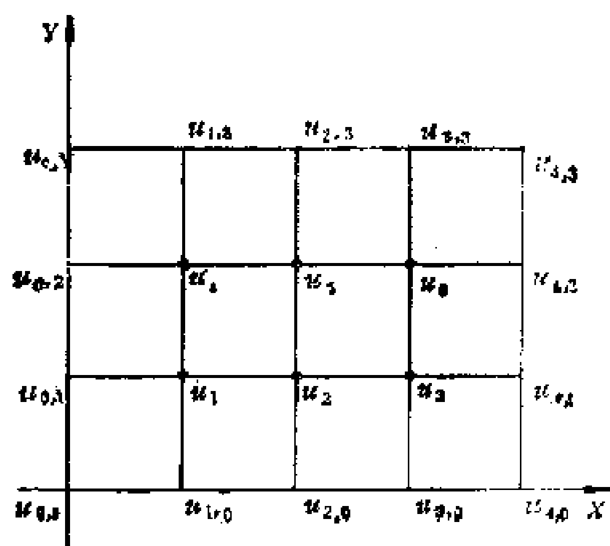


图　8

将方程的差分方程改写为

$$u_{ij}=0.25(u_{i+1,j}+u_{i-1,j}+u_{i,j+1}+u_{i,j-1})$$

并于 $u_i(i=1,2,\cdots,6)$各节点列方程，于是有

$$
\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \\ u_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0.25 & 0 & 0.25 & 0 & 0 \\ 0.25 & 0 & 0.25 & 0 & 0.25 & 0 \\ 0 & 0.25 & 0 & 0 & 0 & 0.25 \\ 0.25 & 0 & 0 & 0 & 0.25 & 0 \\ 0 & 0.25 & 0 & 0.25 & 0 & 0.25 \\ 0 & 0 & 0.25 & 0 & 0.25 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \\ u_6 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0.67678 \\ 0.25000 \\ 0.17678 \\ 0.50000 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}
$$

由于$\|B\|<1$，则可用简单迭代法求方程组的近似解。

将方程组改写成简单迭代形式：

$$
\begin{cases}
u_1^{n+1} = & +0.25u_2^n & +0.25u_4^n & & +0.67678 \\
u_2^{n+1} = 0.25u_1^n & +0.25u_3^n & +0.25u_5^n & & +0.25000 \\
u_3^{n+1} = & +0.25u_2^n & & +0.25u_6^n & +0.17678 \\
u_4^{n+1} = 0.25u_1^n & & +0.25u_5^n & & +0.50000 \\
u_5^{n+1} = & +0.25_2^n & +025u_4^n & +0.25u_6^n & \\
u_6^{n+1} = & +0.25u_3^n & +0.25u_5^n & &
\end{cases}
$$

因对任取初始值，迭代程序都收敛，今取

$$u_0=(1.08984,0.75047,0.42317\\ 0.89337,0.47056,0.22664)^T$$

作迭代解得 $u_{10}=(1.08353,\ 0.74053,\ 0.41686,\ 0.88631,\ 0.46165,\ 0.21964)^T$

习　题　7.3

1　**解**　我们用差商逼近导数，即

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_j,t_n)\doteq\frac{1}{2h}[u(x_{j+1},t_n)-u(x_j,t_n)] \quad (4)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_n)\doteq\frac{1}{h^2}[u(x_{j+1},t_n)-2u(x_j,t_n)+u(x_{j-1},t_n)] \quad (5)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_j,t_n)\doteq\frac{1}{\tau}[u(x_j,t_{n+1})-u(x_j,t_n)] \quad (6)$$

又$a(x,t)$，$b(x,t)$，$c(x,t)$，$d(x,t)$，$u(x,t)$．都在点(x_j,t_n)取值，同时将(4)，(5)，(6)代入(1)有：

$$Lu(x_j,t_n)\doteq\frac{1}{\tau}[u(x_j,t_{n+1})-u(x_j,t_n)]-\\ -\frac{1}{h^2}a(x_j,t_n)[u(x_{j+1},t_n)-2u(x_j,t_n)-\\ -u(x_{j-1},t_n)]-\\ -\frac{1}{2h}b(x_j,t_n)[u(x_{j+1},t_n)-u(x_{j-1},t_n)+\\ +c(x_j,t_n)u(x_j,t_n)=d(x_j,t_n)$$

如果用u_j^n近似代替$u(x_j,t_n)$则得（1）的差分方程逼近．

$$\tau L_{h,\tau}u_j^n=u^{n+1}_j-u_j^n-ra_j^n(u_{j+1}^n-2u_j^n+u^n_{j-1})-\\ -hrb_j^n(u_{j+1}^n-u_{j-1}^n)+\tau C_j^nu_j^n=\tau d_j^n$$

其中 $r=\frac{\tau}{h^2}$为网比。

从差分方程中解 u_j^{n+1}，这时差分格式是显式的。

初始条件（2）和边值条件（3）也需相应的逼近，不过这里特别简单，即有

$$u_j^0=\varphi(x_j),\quad j=1,2,\cdots,N-1 \tag{8}$$

$$u_0^n=\mu_1(n\tau),\quad u_N^n=\mu_2(n\tau),\quad n=1,2,\cdots \tag{9}$$

于是由（7），（8），（9）构成逼近边值问题（1）、（2）、（3）的差分格式。

2　解　定解问题的差分格式为

$$u_j^{n+1}=ru_{j-1}^n+(1-2r)u_j^n+ru_{j+1}^n$$

$$u_j^0=4x_j(1-x_j),\quad j=0,1,2,\cdots,5$$

$$u_0^n=u_N^n=0$$

由条件 $h=0.2$ 可知

$$x_0=0,\quad x_1=0.2,\quad x_2=0.4,\quad x_3=0.6,\quad x_4=0.8,\quad x_5=1$$

又　　$u_j^0=4x_j(1-x_j)$，则有

$$u_0^0=0,\quad u_1^0=4\times0.2(1-0.2)=0.64$$

$$u_2^0=4\times0.4(1-0.4)=0.96,\ u_3^0=4\times0.6(1-0.6)=0.96$$

$$u_4^0=4\times0.8(1-0.8)=0.64,\quad u_5^0=4\times1(1-1)=0$$

由于取　$r=\dfrac{1}{6}$ 则差分格式可以改写为

$$u_j^{n+1}=\frac{1}{6}(u_{j-1}^n+4u_j^n+u_{j+1}^n)$$

下面用简单迭代法进行求 $n=1,2$ 两层节点的数值。

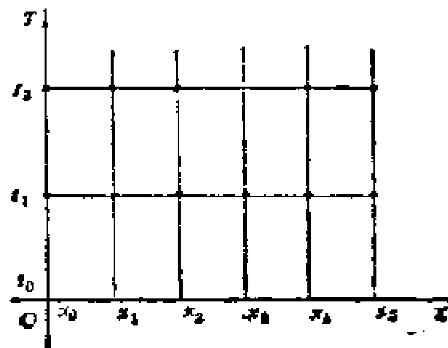


图　9

节点分布如图 9 求其黑点的节点值。

$n=1$ 层各节点数值

$$u_0^1=0$$

$$u_1^1=\frac{1}{6}[0+4\times 0.64+0.96]=0.586667$$

$$u_2^1=\frac{1}{6}[0.64+4\times 0.96+0.96]=0.906667$$

$$u_3^1=\frac{1}{6}[0.96+4\times 0.96+0.64]=0.906667$$

$$u_4^1=\frac{1}{6}[0.96+4\times 0.96+0]=0.586667$$

$$u_5^1=0$$

$n=2$ 层各节点数值

$$u_0^2=0$$

$$u_1^2=\frac{1}{6}[0+4\times 0.586667+0.906667]=0.542225$$

$$u_2^2=\frac{1}{6}[0.586667+4\times 0.906667+0.906667]$$

$$=0.853334$$

$$u_3^2=\frac{1}{6}[0.906667+4\times 0.906667+0.586667]$$

$$=0.853334$$

$$u_4^2=\frac{1}{6}[0.906667+4\times 0.906667+0]=0.542223$$

$$u_5^2=0$$

习　　题 7.4

1　解　我们象处理抛物方程一样，对求解区域 Ω 用直线族分割成矩形网格 $\Omega_{h\tau}$。

在网点 (x_j,t_n) 用关于 t 和 x 的二阶中心差商

$$\frac{u_j^{n+1}-2u_j^n+u_j^{n-1}}{\tau^2}=\left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right)_j^n+O(\tau^2) \qquad (4)$$

$$\frac{u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n}{h^2}=\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_j^n-O(h^2) \qquad (5)$$

代入（1），并去掉截断误差项，便得逼近（1）的差分方程

$$\frac{u_j^{n+1}-2u_j^n+u_j^{n-1}}{\tau^2}-a^2\frac{u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n}{h^2}=0 \qquad (6)$$

$$(j=1,2,\cdots,N-1;n=1,2,\cdots,J-1)$$

其截断误差阶为$O(\tau^2+h^2)$。

下面讨论其初值条件和边值条件的差分近似。

关于双曲方程的初值条件要比抛物方程复杂一些。因为在（2）中除了 $u(x,0)=\varphi(x)$ 外，还有$\frac{\partial u}{\partial t}(x,0)=\psi(x)$，对初始条件处理和抛物的情况一样，得到

$$u_0^j=\varphi(jh)=\varphi_j \qquad (j=1,2,\cdots,N-1)$$

对于 $\frac{\partial u}{\partial t}(x,0)=\psi(x)$，用两种方法进行处理：

第一种方法，将$\frac{\partial u}{\partial t}(x_j,0)$改为差商

$$\frac{u(x_j,\tau)-u(x_j,0)}{\tau}=\psi(x_j)+O(\tau)$$

结合前一条件，略去 $O(\tau)$ 就得到$\frac{\partial u}{\partial t}(x_j,0)$的差分近似

$$u_j^1=\varphi_j+\tau\psi_j \qquad (j=1,2,\cdots,N-1) \qquad (7)$$

已知差分方程（6）逼近微分方程（1）的误差为$O(\tau^2+h^2)$。但是初值条件的差分近似（7）的逼近误差是$O(\tau)$，为了使二者相适应，我们采取另外的办法作$\frac{\partial u}{\partial t}(x,0)=\psi(x)$ 的差分近似。

第二种方法，对$\frac{\partial u}{\partial t}(x_j,0)=\psi(x_j)$ 作差商

$$\frac{u(x_j,\tau_1)-u(x_j,\tau_{-1})}{2\tau}=\frac{\partial u}{\partial t}(x_j,0)+O(\tau^2) \quad (8)$$

作为后一条件的差分近似。由于（8）还引进了新的未知数 u_j^{-1}，为确定 u_j^{-1}，我们把 $(x_j,0)$ 上的差分方程（6）即

$$u_j^1-2u_j^0-u_j^{-1}-\frac{a^2\tau^2}{h^2}(u_{j+1}^0-2u_j^0+u_{j-1}^0)=0 \quad (9)$$

和（8）联立，消去其中的 u_j^{-1}，得到

$$u_j^1=\varphi_j+\tau\psi_j+\frac{a^2\tau^2}{2h^2}(\varphi_{j+1}-2\varphi_j+\varphi_{j-1}) \quad (10)$$

对边值条件（3）可以用简单迁移为

$$u_0^n=\mu_1(n\tau),\ u_N^n=\mu_2(n\tau)$$

综上我们得到混合问题（1），（2），（3）的下列两种差分格式（Ⅰ）、（Ⅱ），其中 $r=\frac{a\tau}{n}$。

$$(\text{Ⅰ})\begin{cases} u_j^{n+1}=r^2u_{j+1}^n+2(1-r^2)u_j^n+r^2u_{j-1}^n-u_j^{n-1} \\ \qquad\qquad (j=1,2,\cdots,N-1) \\ u_j^0=\varphi_j,\ u_j^1=\varphi_j+\tau\psi_j \\ u_0^n=\mu_1(n\tau),\ u_N^n=\mu_2(n\tau),\ (n=1,2,\cdots,J) \end{cases}$$

$$(\text{Ⅱ})\begin{cases} u_j^{n+1}=r^2u_{j+1}^n+2(1-r^2)u_j^n+r^2u_{j-1}^n-u_j^{n-1} \\ \qquad\qquad (j=1,2,\cdots,N-1) \\ u_j^0=\varphi_j,\ u_j^1=\varphi_j+\tau\psi_j+\frac{a^2\tau^2}{2}\left[\frac{\varphi_{j+1}-2\varphi_j+\varphi_{j-1}}{h^2}\right] \\ \qquad\qquad (j=1,2,\cdots,N-1) \\ u_0^n=\mu(n\tau),\quad u_N^n=\mu_2(n\tau)(n=1,2,\cdots,J) \end{cases}$$

差分格式（Ⅰ），（Ⅱ）都是显格式，它的解可以逐层求出。第二种方法得到的初值条件，差分近似要比第一种方法得到的差分近似精确些。

2　解　由1题差分格式（Ⅰ）可得本问题的差分格式应为

$$\begin{cases} u_j^{n+1} = r^2 u_{j+1}^n + 2(1-r^2)u_j^n + r^2 u_{j-1}^n - u_j^{n-1} \\ u_j^0 = \sin\pi x_j, \quad u_j^1 = \sin\pi x_j + \tau x_j(1-x_j) \\ u_0^n = u_N^n = 0 \end{cases}$$

由于取 $r=1(r=\frac{\tau}{h})$，$h=0.2$，则其差分格式应改写为

$$\begin{cases} u_j^{n+1} = u_{j+1}^n + u_{j-1}^n - u_j^{n-1} \\ u_j^0 = \sin\pi x_j, u_j^1 = \sin\pi x_j + \frac{1}{5}x_j(1-x_j) \\ u_0^n = u_N^n = 0 \end{cases}$$

下面用简单迭代法求$n=1,2,3$层节点的数值．节点分布如图10

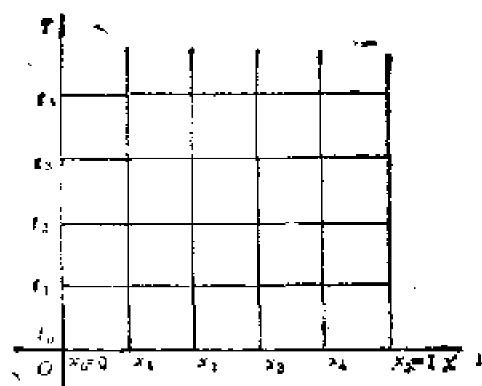


图　10

首先我们用 $u_j^0=\sin\pi x_j$， 将第零层各节点数值计算出来，结果如下：

$u_0^0=0$

$u_1^0=\sin\pi x_1=\sin0.2\pi=0.5878$

$u_2^0=\sin\pi x_2=\sin.04\pi=0.9511$

$u_3^0=\sin\pi x_3=\sin0.6\pi=0.9511$

$u_4^0=\sin\pi x_4=\sin0.8\pi=0.5878$

$u_5^0=\sin\pi x_5=\sin\pi=0$

第二再由$u_i^1=\sin\pi x_j+\frac{1}{5}x_j(1-x_j)$计算第一层各节点上的数值

$n=1 \quad u_0^1=0$

$$u_1^1=\sin\pi x_1+\frac{1}{5}x_1(1-x_1)=0.6198$$

$$u_2^1=\sin\pi x_2+\frac{1}{5}x_2(1-x_2)=0.9991$$

$$u_3^1=\sin\pi x_3+\frac{1}{5}x_3(1-x_3)=0.9991$$

$$u_4^1=\sin\pi x_4+\frac{1}{5}x_4(1-x_4)=0.6198$$

$u_5^1=0$

第三我们这时就可以利用 $u_j^{n+1}=u_{j+1}^n+u_{j-1}^n-u_j^{n-1}$将 $n=2$, 3,⋯各层节点数值算出。

$n=2 \quad u_0^2=0$

$u_1^2=u_2^1+u_0^1-u_1^0=0.4113$

$u_2^2=u_3^1+u_1^1-u_2^0=0.6678$

$u_3^2=u_4^1+u_2^1-u_3^0=0.6678$

$u_4^2=u_5^1+u_3^1-u_4^0=0.4113$

$u_5^2=0$

$n=3 \quad u_0^3=0$

$u_1^3=u_1^2+u_0^2-u_1^1=0.0480$

$u_2^3=u_3^2+u_1^2-u_2^1=0.0800$

$u_3^3=u_4^2+u_2^2-u_3^1=0.0800$

$u_4^3=u_5^2+u_3^2-u_4^1=0.0480$

3 解 设 $h=1$, $r=1$, $\frac{10-5}{h}=5$, $\tau=hr=1$. 其差分方程为

$$\begin{cases} u_i^{n+1} = u_{i-1}^n + u_{i+1}^n - u_i^{n-1}, & i = 1, 2, , 3, 4, \\ & n = 0, 1, 2, 3\cdots \\ u_i^0 = u(5 + ih, 0) = 5 + ih - 1 = 4 + ih, & \\ & i = 1, 2, 3, 4 \\ u_0^n = u_5^n = 0, \quad n = 0, 1, 2, \cdots & \\ u_i^1 = u_i^0, \quad i = 0, 1, 2, 3, 4, 5 & \end{cases}$$

列表计算如下

t_k \ u_{ik} \ x_i	5	6	7	8	9	10
0	0	5	6	7	8	0
1	0	5	6	7	8	0
2	0	1	6	7	−1	0
3	0	1	2	−2	−1	0
4	0	1	−7	−6	−1	0
5	0	−8	−7	−6	−5	0

习 题 7.6

1 解

（一）将区间进行剖分

为了方便起见我们将区间[0，1]进行等距离剖分，即

$$0 = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots\cdots < x_9 < x_{10} = 1$$

第 i 单元 $e_i = x_i - x_{i-1}$，其单元长度为

$$h = x_i - x_{i-1} = 0.1 \qquad (i = 1, 2, \cdots, 10)$$

（二）选择基函数并给出方程在每个单元上的近似解$\widetilde{u}(x)$

（1）基函数选为一次线性元，一般形式为：

$$
\varphi_j(x)=\begin{cases}0 & x\leqslant x_{j-1}\\ \dfrac{1}{h}(x-x_{j-1}) & x_{j-1}\leqslant x\leqslant x_j\\ \dfrac{1}{h}(x_{j+1}-x) & x_j\leqslant x\leqslant x_{j+1}\\ 0 & x\geqslant x_{j+1}\end{cases}
$$

（2）$\varphi_j(x)$在每个单元上的具体形式

$$\varphi_0(x)=\frac{1}{h}(x_1-x_0)=1-10x,\quad x_0\leqslant x\leqslant x_1$$

$$\varphi_1(x)=\begin{cases}10x & x_0\leqslant x\leqslant x_1\\ 2-10x & x_1\leqslant x\leqslant x_2\end{cases}$$

$$\varphi_2(x)=\begin{cases}10x-1 & x_1\leqslant x\leqslant x_2\\ 3-10x & x_2\leqslant x\leqslant x_3\end{cases}$$

$$\varphi_3(x)=\begin{cases}10x-2 & x_2\leqslant x\leqslant x_3\\ 4-10x & x_3\leqslant x\leqslant x_4\end{cases}$$

$$\varphi_4(x)=\begin{cases}10x-3 & x_3\leqslant x\leqslant x_4\\ 5-10x & x_4\leqslant x\leqslant x_5\end{cases}$$

$$\varphi_5(x)=\begin{cases}10x-4 & x_4\leqslant x\leqslant x_5\\ 6-10x & x_5\leqslant x\leqslant x_6\end{cases}$$

$$\varphi_6(x)=\begin{cases}10x-5 & x_5\leqslant x\leqslant x_6\\ 7-10x & x_6\leqslant x\leqslant x_7\end{cases}$$

$$\varphi_7(x)=\begin{cases}10x-6 & x_6\leqslant x\leqslant x_7\\ 8-10x & x_7\leqslant x\leqslant x_8\end{cases}$$

$$\varphi_8(x)=\begin{cases}10x-7 & x_7\leqslant x\leqslant x_8\\ 9-10x & x_8\leqslant x\leqslant x_9\end{cases}$$

$$\varphi_9(x)=\begin{cases}10x-8 & x_8\leqslant x\leqslant x_9\\ 10-10x & x_9\leqslant x\leqslant x_{10}\end{cases}$$

$$\varphi_{10}(x)=\frac{1}{h}(x-x_9)=10x-9,\quad x_9\leqslant x\leqslant x_{10}$$

（3） $\varphi_j(x)$，$(j=0,1,2,\cdots,10)$的几何图形如图11。

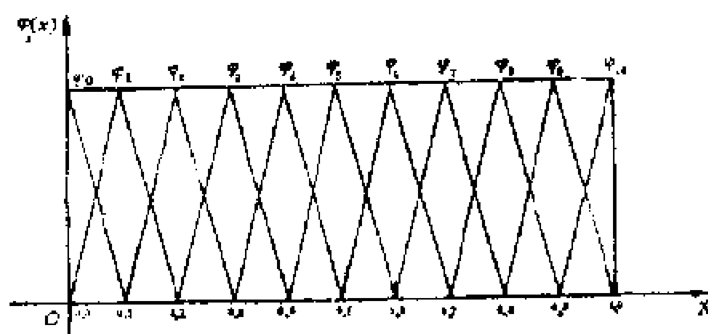


图 11

（4） 在第 k 个单元内，用线性插值函数

$$\widetilde{u}_k(x)=\frac{1}{h}[(x-x_k)u_{k+1}+(x_{k+1}-x)u_k]$$

来代替方程的解 $u(x)$。在整个区间$[0,1]$可用

$$\widetilde{u}(x)=\sum_{j=1}^{9}\varphi_j(x)u_j$$

来近似代替方程在整个区间内的解。此问题只要我们求出 u_j 即可。

为此下面我们从有限元方程入手，有限元方程为

$$\int_0^1\Big(\sum_{j=1}^{9}u_{0j}\varphi_{j0}\Big)'\varphi'_i\,dx=\int_0^1 f\varphi_i\,dx\quad(i=1,2,\cdots 9)$$

即为

$$\begin{pmatrix}\int_0^1\varphi_1'\varphi_1'dx & \int_0^1\varphi_2'\varphi_1'dx\cdots\int_0^1\varphi_9'\varphi_1'dx\\ \int_0^1\varphi_1'\varphi_2'dx & \int_0^1\varphi_2'\varphi_2'dx\cdots\int_0^1\varphi_9'\varphi_2'dx\\ \cdots\cdots & \cdots\cdots\\ \int_0^1\varphi_1'\varphi_9'dx & \int_0^1\varphi_2'\varphi_9'dx\cdots\int_0^1\varphi_9'\varphi_9'dx\end{pmatrix}\begin{pmatrix}u_1\\ u_2\\ \vdots\\ u_9\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\int_0^1 f\varphi_1dx\\ \int_0^1 f\varphi_2dx\\ \cdots\\ \int_0^1 f\varphi_9dx\end{pmatrix}$$

（三） 单元刚度矩阵计算

$$k_{00}^{(0)}=\int_0^{0.1}[\varphi_0'(x)]^2dx=\int_0^{0.1}[(1-10x)']^2dx=10$$

$$k_{01}^{(0)}=\int_0^{0.1}\varphi_0'(x)\,\varphi_1'(x)dx=\int_0^{0.1}(1-10x)'\,(10x)'\,dx$$

$$= -10$$

$$k_{10}^{(0)} = \int_0^{0.1} \varphi_1'(x)\varphi_0'(x)dx = \int_0^{0.1} (10x)'(1-10x)'dx$$

$$= -10$$

$$k_{11}^{(1)} = \int_0^{0.1} [\varphi_1'(x)]^2 dx = \int_0^{0.1} [(10x)']^2 dx = 10$$

$$k_{11}^{(1)} = \int_{0.1}^{0.2} [\varphi_1'(x)]^2 dx = \int_{0.1}^{0.2} [(2-10x)']^2 dx = 10$$

$$k_{12}^{(0)} = \int_{0.1}^{0.2} \varphi'_1(x)\varphi_2'(x)dx$$

$$= \int_{0.1}^{0.2} (2-10x)'(10x-1)'dx = -10$$

$$k_{21}^{(1)} = \int_{0.1}^{0.2} \varphi_2'(x)\varphi'_1(x)dx = \int_{0.1}^{0.2} (10x-1)'(2-10)'dx$$

$$= -10$$

$$k_{22}^{(1)} = \int_{0.1}^{0.2} [\varphi'_2(x)]^2 dx = \int_{0.1}^{0.2} [(10x-1)']dx = 10$$

$$k_{22}^{(2)} = \int_{0.2}^{0.3} [\varphi_2'(x)]^2 dx = \int_{0.02}^{0.3} [(3-10x)']^2 dx = 10$$

如此下去一般的有

$$k_{ij}^{(i)} = \begin{cases} 10 & i=j \\ -10 & |i-j|=1 \\ 0 & |i-j|>1 \end{cases}$$

$$(i, j = 0, 1, 2, , \cdots, 10)$$

由此可知单位刚度矩阵为

$$k^{(1)} = k^{(2)} = \cdots = k^{(10)} = \begin{pmatrix} 10 & -10 \\ -10 & 10 \end{pmatrix}$$

（四）总刚度矩阵为

$$K = \begin{pmatrix} 10 & -10 & & & \\ -10 & 20 & -10 & & \\ & -10 & 20 & -10 & \\ & & -10 & 20 & -10 \\ & & & -10 & 10 \end{pmatrix}$$

（五）计算右端项 g

$$g_1=\int_0^1 f(x)\varphi_1(x)dx=\int_0^{0.1}1\cdot 10xdx+\int_{0.1}^{0.2}(2-10x)dx$$

$$=0.1$$

同理

$$g_i=\int_0^1 f(x)\varphi_i(x)dx=\int_0^1 1\cdot\varphi_i(x)dx=0.1$$

$$(i=1,2,\cdots,9)$$

（六）利用边值条件 $u(0)=u(1)=0$则有有限元方程组

$$\begin{pmatrix} 20 & -10 & & & \\ -10 & 20 & 10 & & \\ & -10 & 20 & -10 & \\ & & \ddots & & \\ & & & -10 & 20 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_9 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0.1 \\ 0.1 \\ \vdots \\ 0.1 \end{pmatrix}$$

（七）解方程组

$$\begin{cases} 20u_1-10u_2 = 0.1 \\ -10u_1+20u_2-10u_3 = 0.1 \\ -10u_2+20u_3-10u_4 = 0.1 \\ -10u_3+20u_4-10u_5 = 0.1 \\ -10u_4+20u_5-10u_6 = 0.1 \\ -10u_5+20u_6-10u_7 = 0.1 \\ -10u_6+20u_7-10u_8 = 0.1 \\ -10u_7+20u_8-10u_9 = 0.1 \\ -10u_8+20u_9 = 0.1 \end{cases}$$

把上面各式相加得

$$10u_1+10u_9=0.9$$

又 $\quad 10u_2=20u_1-0.1$

所以 $\quad u_2=2u_1-0.01$

$$u_3=2u_2-u_1-0.01=3u_1-0.03$$

$$u_4=2u_3-u_2-0.01=4u_1-0.06$$

$$u_5 = 2u_4 - u_3 - 0.01 = 5u_1 - 0.10$$

$$u_6 = 2u_5 - u_4 - 0.01 = 6u_1 - 0.15$$

$$u_7 = 2u_6 - u_5 - 0.01 = 7u_1 - 0.21$$

$$u_8 = 2u_7 - u_6 - 0.01 = 8u_1 - 0.28$$

$$u_9 = 2u_8 - u_7 - 0.01 = 9u_1 - 0.36$$

因为 $\quad u_9 = 0.09 - u_1$

所以 $\quad 9u_1 - 0.36 = 0.09 - u_1$

故有

$$u_1 = 0.045, \quad u_2 = 0.080, \quad u_3 = 0.105$$

$$u_4 = 0.120, \quad u_5 = 0.125, \quad u_6 = 0.120$$

$$u_7 = 0.105, \quad u_8 = 0.080, \quad u_9 = 0.045$$

于是得在区间[0, 1]内方程近似解为

$$\begin{aligned}\widetilde{u}(x) = {} & 0.045\varphi(x) + 0.080\varphi_2(x) + 0.105\varphi_3(x) \\ & + 0.120\varphi_4(x) + 0.125\varphi_5(x) + 0.120\varphi_6(x) \\ & + 0.105\varphi_7(x) + 0.080\varphi_8(x) + 0.045\varphi_9(x)\end{aligned}$$

则在各个单元上的近似解为

$$\widetilde{u_K}(x)\begin{cases} 0.45x & x \in e_1 \\ 0.35x + 0.01 & x \in e_2 \\ 0.25x + 0.03 & x \in e_3 \\ 0.15x + 0.06 & x \in e_4 \\ 0.05x + 0.01 & x \in e_5 \\ -0.05x + 0.15 & x \in e_6 \\ -0.15x + 0.21 & x \in e_7 \\ -0.25x + 0.28 & x \in e_8 \\ -0.35x + 0.36 & x \in e_9 \\ -0.45x + 0.45 & x \in e_{10}\ (k = 1, 2, \cdots, 10) \end{cases}$$

以上即为所求之近似解。

其实方程

$$\begin{cases} -u''(x)=1, & 0<x<1 \\ u(0)=u(1)=0 \end{cases}$$

的精确解为

$$u(x)=0.5x(1-x)$$

而$\widetilde{u_k}(x)$与$u(x)$在节点的$x_i(i=0,1,2,\cdots,10)$的值是相等的。

后　记

本书由白玉山主编，参加编写的有姜儒明副教授、高益明、朱日照、徐楨殿、倪平同志，参加编写学习指导及解答的有战心和、李才、王青翔、杨述春同志，还承蒙辽宁大学数学系朱国桢、姜玉宣同志审阅了原稿．在此谨表谢意．

由于我们水平所限，书中一定有很多疏漏、错误的地方，敬请读者批评指正。

编　者

1983・7